



INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA



MEMORIA DE LA LABOR REALIZADA AÑO 2013

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS

ANNUAL REPORT 2013



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 2013, 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 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 en la frontera de la actividad científica representada por la investigación que en él se desarrolla.

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2013 en 179 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 2013, 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 Disordered Media Spectroscopy (ENVYMED)
Molecular Physics (FM)
Macromolecular Physics (FMM)

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

The mission of the IEM, 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 a reference institution on the frontier of the scientific activity represented by the research that it develops.

This scientific activity, during 2013, has crystallized in 179 ISI publications.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
INSTITUTE ORGANIZATION

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

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. José González Carmona

Dr. Rafael Molina Fernández

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dra. M^o del Sagrario Martínez Ramírez

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. Juan Francisco Vega Borreguero

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

Dr. Gianluca Calcagni

M^a Vega Cañamares Arribas

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

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
 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 Suquibide
 Dra. M^a Luisa Senent Díez
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. Vicente Timón Salinero
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Prof. 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
 Dr. Pedro Sarriguren Suquibide
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dra. María Luisa Senent Díez
 Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández
 Dr. Gianluca Calcagni
 Dr. Jordi Mur Petit
 Dr. Javier Rodríguez Laguna

Dr. Mathias Lunde

Dra. Rosa Domínguez Gómez
 Dr. Carlos Esebbag Benchimol
 Dr. Luis Javier Garay Elizondo
 Dra. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)
 D. Daniel Huerga Gómez
 D. Mikel Fernández Méndez
 D. Daniel Martín de Blas

Dña. Laura Castelló Gomar
 D. Juan Margalef Bentabol

Dr. Óscar Moreno Díaz
 Dña. Diana Navas Nicolás
 Dña. Laura Ortiz Martín

Dr. Nicu Sandulescu

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigadora Científica / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Investigador Contratado RyC/Postdoc Contract RyC
 Postdoctoral (JAE Doc) / Postdoc contract (JAE Doc)
 Postdoctoral asociado a proyecto / Postdoc from research grant (until 31st January 2013).
 Postdoctoral asociado a proyecto / Postdoc from research grant (15th February to 31st March 2013).
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher
 PI Vinculada Ad Honorem / Ad Honorem PI
 Contrato Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
 Contrato Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
 Contrato Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE (until August 2013)
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay (since September 2013)
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay (since September 2013)
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay (December 2013)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Isabel Pacho Velázquez

Contratado Técnico-JAE / Technician-JAE (since September 2011 until october 2013)

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera
 Profa.. Mª José García Borge

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

Prof. José V. García Ramos
 Prof. Olof Erik Tengblad
 Dr. Carlos Cabrillo García
 Dr. Pedro Carmona Hernández
 Dra. Andrea Jungclauss
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dra. Mª Vega Cañamares Arribas
 Dr. Luis Díaz Sol
 Dr. Ricardo Fernández Perea
 Dra. Sagrario Martínez Ramírez
 Dr. José Sánchez del Río Sáez
 Dr. Alexander Gottberg
 Dra. Ana Delia Becerril Reyes
 Dr. Luis Froufe Pérez
 Dra. Isabel Sánchez Alonso
 Dra. Marina Molina Santos
 Dra. Paz Sevilla Sierra
 D. José Antonio Briz Monago
 Dña. Elisa Corda
 D. Alejandro Garzón Camacho

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigadora Científica / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Contrato Postdoctoral GANAS / Postdoc contract GANAS
 Contrato Postdoctoral / Postdoc contract (until May)
 Contrato Postdoctoral EXNUC/ Postdoc contract EXNUC
 Contrato Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE
 Contrato Postdoctoral JDC/ Postdoc Contract JDC
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Titulado Superior Contratado/University Graduate
 Titulado Superior Contratado / University Graduate –
 Technician (since September 2013)
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Titulado Superior Contratado / University Graduate
 Becario Predoctoral JAE / PhD FellowshipJAE
 Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE
 Becario Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay

D. Andrés Illana Sisón
 D. Eduardo López Tobar
 D. Rubén Lorenzo Ortega
 D. Vicente Pesudo Fortes
 D. Jan Taprogge
 D. Mariano Carmona Gallardo
 Dña. Adianeiz García Leis
 D. Ramón Paniagua Domínguez
 D. Guillermo Ribeiro Jiménez
 Dña. Jana Kubackova

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. Enrique Nácher González
 D. Ángel Perea Martínez
 Dña. Purificación Corchete Corchete

Titulado Superior Especializado / Researcher
 Técnico Especializado G. Medio / Technician
 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 (until 4-11-2013)

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular/ Tenured Scientist (since 4-11-2013)

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 (until March 25)

PI Ad Honorem/ Ad Honorem PI (since March 26)

Dr. José María Fernández Sánchez

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Belén Maté Naya

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Vicente Timón Salinero

Científico Titular/Tenured Scientist (since April 18)

Dr. Óscar Gálvez González

Postdoctoral RyC/Postdoc Contract RyC

Dra. Delia Fernández-Torre

Postdoctoral Proyecto PN/Postdoc Contract Project PN (since February 1)

Dr. Francisco Gámez Márquez

Postdoctoral Junta de Andalucía/Postdoc Contract Junta de Andalucía (until October 31)

Dra. Elena Moreno Atahonero

Postdoctoral CONSOLIDER/Postdoc Contract-CONSOLIDER

Dra. Yamilet Rodríguez Lazcano

Postdoctoral JAE/Postdoc Contract JAE (until August 31)

Dr. Alexandre Francois Zanchet

Postdoctoral Proyecto PN/ Postdoc Contract Project PN (until August 31)

Dña. Teresa Cueto Senra

Titulado superior contratado / MSc contract

D. Miguel Jiménez Redondo

Becario predoctoral FPI/Ph D fellow-FPI

D. Francisco Colmenero Ruiz

Autorizado Permanencia /Authorized Stay (since July 23)

D. Juan Hernández Morilla

Autorizado Permanencia/Authorized Stay (until February 28)

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Miguel Ángel Moreno Alba

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 (until 4-11-2013)

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular /Tenured Scientist (since 4-11-2013)

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. María Esperanza Cagiao Escotado

Científico Titular / Tenured Scientist (until 31-07-2013)

Dra. María José Capitán Aranda

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Víctor Cruz Cañas
 Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat
 Dra. María Cruz García Gutiérrez
 Dra. Amelia Linares Dos Santos
 Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 Dr. Alejandro Sanz Parras
 Dra. Michela Soccio
 Prof. Francisco José Baltá Calleja
 Dra. Carmen Arribas Arribas
 Dña. Jing Cui
 D. Juan Felipe Franco González
 D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato
 D. Álvaro Rodríguez Rodríguez
 D. Daniel Martínez Tong
 Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Investigador Contratado R&C / Postdoc Contract R&C
 Postdoctoral JAE DOC / Postdoc JAE
 Postdoctoral JAE DOC / Postdoc JAE
 PI Ad Honorem / Ad Honorem PI
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Becaria Predoctoral/ PhD Fellowship
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
 Becario Predoctoral / PhD Fellowship
 Becario Predoctoral / PhD Fellowship (from 01-07-2013)
 Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE
 Autorizado Permanencia/Authorized Stay (until 30-09-2013)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara
 D. Rafael Núñez Ramírez
 Dña. María José Malagón Sisto

Titulado Superior Especializado / Specialized University
 Graduate
 Titulado Superior Especializado / Specialized University
 Graduate
 Ayudante de Investigación / Research Assistant (from 15-02-2013)

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE OFFICE

Dña. Pilar Criado Escribano
 Dña. Concepción Nieto Serrano
 Dña. Purificación Díez Rodríguez
 Dña. Alicia Fernández Clavero
 Dña. Ana María García Arribas
 Dña. Carmen García Collado
 Dña. Beatriz Gil Sánchez

Dña. Susana Esteban Serrano
 Dña. Isabel Lombán Botello
 Dña. Silvia Barrios Domínguez

Gerente
 Cuerpo Técnico de Informática de la Admon. del Estado
 Cuerpo General Admvo. de la Admon. del Estado
 Ayudante de Investigación de OPIS (CFMAC)
 Ayudante de Investigación de OPIS
 Ayudante de Investigación de OPIS
 Cuerpo General Admvo. de la Admon. del Estado
 (since 02/01/2013)
 Cuerpo Auxiliares Postales y de Telégrafos
 Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo
 Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE (also
 support staff of the Dpt. of Macromolecular Physics)
 (until 15-11-2013)

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

ALMACÉN / WAREHOUSE

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García
 D. José Manuel Segura González

Cuerpo General Administrativo de la Admon. del Estado
 Cuerpo Auxiliares de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dña. Flora Granizo Barrena
 Dña. Beatriz Fernández Suzor
 Dña. Isabel Delgado Oliva
 D. Samuel López Márquez

Técnico Superior Especializado de OPIS
 Técnico Especializado de OPIS (since 01-02- 2013)
 Técnico Especializado de OPIS
 Administrativo de OPIS

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbás Utrilla
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA / COMPUTER SERVICES

D. Francisco Daniel Rincón Fuentes

Técnico Especializado de OPIS

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

Dña. Belén Palero Fernández
D. Fernando Pueyo García
D. Héctor Bueno Durán

D. Enrique Sánchez Gutiérrez

Ayudante de Investigación OPI
Técnico Especialista Grado Medio OPI
Técnico Superior de Actividades Técnicas y Profesionales
(until 15 october 2013)
Contratado Oficial de Actividades Téc. y Profesionales
(since 1 december 2013)

PROYECTOS Y DELINEACIÓN / PROJECTS AND DELINEATION

D. Andrés de Frutos Gómez

Titulado Técnico Especializado (until 18th april 2013)

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.
- Física Atómica y Molecular a muy baja temperatura.
- Químico-Física Teórica aplicada a la astrofísica y al estudio de nuevos materiales

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravedad y Cosmología Cuánticas de Lazos.
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- 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.
- Átomos y moléculas en degeneración cuántica o en redes ópticas.
- Simulación cuántica y metrología cuántica.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperatura.
- Interacciones de Van der Waals en ZIFs.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.
- Grupo de renormalización.
- Simulaciones Monte Carlo de teorías cuánticas de campos.
- Resolución numérica de la ecuación de gap incluyendo la formación de pares ligados (moléculas).
- Técnicas de Óptica Cuántica para la resolución de las ecuaciones ópticas de Bloch.
- Métodos de control cuántico coherente.
- Campos medios jerárquicos.
- Modelos cuánticos exactamente solubles.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Propiedades de desintegración nucleares en medios estelares.

Hemos continuado con el estudio de las propiedades de desintegración en núcleos de especial interés en astrofísica, concentrándonos en las propiedades de núcleos de la capa fp que son los constituyentes básicos del núcleo estelar en las últimas etapas de su evolución. En particular, los procesos de captura electrónica (EC) son mecanismos fundamentales para entender la nucleosíntesis de elementos pesados y la estructura de las formaciones pre-supernova que eventualmente conducen a supernovas por colapso gravitacional (tipo II) o por explosiones termonucleares en sistemas binarios (tipo Ia). Los procesos de EC vienen determinados por la respuesta de espín-isospín Gamow-Teller (GT) del núcleo y por el espacio de fase que corresponde a la captura de electrones degenerados en el plasma estelar. En el caso de núcleos inestables la respuesta GT se extrae experimentalmente de desintegraciones beta. En el caso de núcleos estables o próximos a la estabilidad como es nuestro caso, 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 las secciones eficaces son proporcionales a los elementos de matriz GT sin las restricciones energéticas propias de la desintegración beta.

En este trabajo hemos estudiado estas propiedades mediante modelos basados en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) con campos medios obtenidos autoconsistente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme (SLy4) y correlaciones de apareamiento. En primer lugar estudiamos la distribución de intensidad GT mediante nuestra aproximación microscópica y comparamos nuestros resultados tanto con la información experimental sobre distribuciones GT obtenidas en reacciones de intercambio de carga (n,p) o sus asociadas (t,3He) y (d,2He) en alta resolución, como con los cálculos más sofisticados que existen hoy en día de Modelos de Capas. Mediante nuestro formalismo conseguimos un acuerdo muy razonable con la información experimental y una descripción comparable a la del Modelo de Capas. Una vez demostrada la capacidad de nuestro formalismo para reproducir la información experimental existente, estudiamos las tasas de EC en función de la densidad y temperatura propias de los medios estelares. Mostramos que mientras que a bajas densidades y temperaturas las tasas EC son muy sensibles a los detalles de la distribución GT a bajas energías, para condiciones de altas densidades y temperaturas las tasas EC dependen en mayor medida de la descripción global de la distribución GT y no tanto de los detalles a baja energía.

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 radiactiva, que juegan un papel muy importante un procesos de nucleosíntesis estelar, y en particular en lo que se refiere al salto de los puntos de espera o “waiting points”, y por otro procesos específicamente nucleares, colisiones tanto entre un sistema de dos partículas y un blanco, como colisiones entre tres partículas, para las cuales, las particularidades de los potenciales adiabáticos asociados al método de expansión adiabática permiten distinguir de manera sencilla entre los distintos canales: elástico, inelástico, ruptura o “breakup”, y reconfiguración o “rearrangement”.

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

SISTEMAS MESOSCOPICOS Y FUERTEMENTE CORRELACIONADOS

Transporte cuántico

Analizamos la fase de transmisión a través de puntos cuánticos en el régimen del bloqueo de Coulomb. En experimentos de interferometría Aharonov-Bohm se ha comprobado una transición en el comportamiento de la fase de transmisión entre un régimen mesoscópico donde los saltos de fase aparecen de forma aleatoria entre resonancias y otro universal donde los saltos de fase están presentes entre todas las resonancias. Esta transición aparece en función del número de electrones en el punto cuántico. Hemos calculado la conductancia y la fase de transición utilizando el método de embebido en combinación con el algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad para diversos modelos de punto cuántico incluyendo diferentes valores de la interacción y diferentes valores del acoplo a los contactos. La interacción electrónica aumenta de forma sistemática el número de saltos de la fase. Sin embargo, achacamos la causa de este aumento a un fenómeno de colectivización de las resonancias que presenta efectos muy diferentes a los observados en experimentos. Estos resultados sugieren que las correlaciones en las funciones de onda de puntos cuánticos caóticos son la causa más probable de la aparición de un régimen universal en la fase de transmisión.

Estudiamos el decaimiento de paquetes de onda en billares discretos caóticos y regulares (v. Fig. 1). Aunque las características espectrales de los billares son muy distintas entre el caso regular y el caso caótico, las propiedades del decaimiento son similares. En ambos casos están dominadas por los estados en el centro de la banda. Una vez se abre el billar estos estados se dividen en estados que se acoplan muy bien al exterior del billar y estados que no decaen (estados "scar"). Los primeros son responsables del comportamiento exponencial a tiempos cortos y los segundos son responsables del comportamiento a tiempos largos en que parte del paquete de onda nunca abandona el billar. Estos estados tienen interesantes aplicaciones potenciales en el transporte cuántico de distintos sistemas. Presentamos diversas aplicaciones en experimentos con guías de onda fotónicas, gases fríos y circuitos cuánticos superconductores.

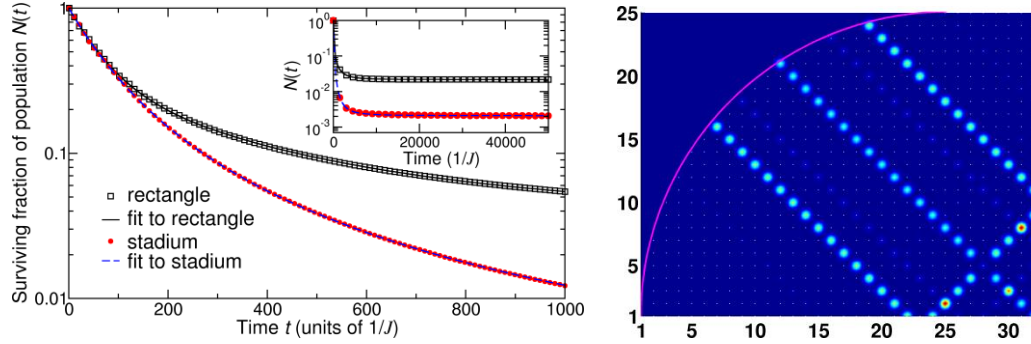


Fig. 1. (Izq.) Número de partículas que permanecen en el billar en función del tiempo, para un billar con forma rectangular (cuadrados negros) y para un estadio (puntos rojos). (Der.) Ejemplo de estado "scar" en el estadio.

Propiedades electrónicas y elásticas del grafeno

Durante el año 2013 se han investigado las propiedades electrónicas y elásticas del grafeno, prestando atención a efectos estadísticos de muchos cuerpos que pueden modificar significativamente la dispersión a baja energía de fonones así como de cuasipartículas de electrón. En este sentido, se ha estudiado la influencia de los grados de libertad electrónicos en la renormalización de la rama acústica de los fonones fuera del plano de grafeno (fonones flexurales) y el consiguiente desarrollo de una inestabilidad en la dispersión de los fonones a gran longitud de onda. Además, se ha llevado a cabo un extenso análisis numérico del sistema electrónico en interacción para establecer la generación dinámica de una brecha de energía en el espectro, distinguiendo entre la condensación de excitones convencional y el desarrollo alternativo de un término de masa rompiendo la invariancia frente a paridad e inversión temporal (la así llamada masa de Haldane).

En el problema de renormalización de los fonones, se ha completado un análisis previo sobre el papel desempeñado por la interacción electrón-fonón, empleando en esta ocasión una formulación autoconsistente del problema de muchos cuerpos para los fonones flexurales. Así, se han resuelto las ecuaciones de Schwinger-Dyson para este sistema adoptando la llamada aproximación de apantallamiento autoconsistente. En este esquema, el propagador de la interacción se corrige por excitaciones de electrón-hueco así como de fonones, mientras que la interacción se aplica a su vez en el cálculo de la renormalización de la dispersión de los fonones a través de correcciones de autoenergía. Se ha mostrado que la resolución iterativa de las ecuaciones es posible en general, trabajando con una discretización de las variables de momento y frecuencia que tiene la capacidad de incorporar efectos de temperatura finita. Los resultados obtenidos para la renormalización de los fonones flexurales han desvelado la existencia de tres regímenes diferentes, dependiendo de la intensidad de la interacción electrón-fonón. La dispersión de los fonones sufre en general una renormalización a la baja a partir del acoplo con los grados de libertad electrónicos si bien, para una intensidad de la interacción no muy grande, el sistema de fonones puede ser caracterizado todavía por un conjunto de parámetros regulares. Por encima de un cierto valor del acoplo electrón-fonón, sin embargo, las ecuaciones autoconsistentes sólo pueden ser resueltas en términos de una autoenergía de fonón que se vuelve compleja, apuntando a una inestabilidad de los modos de fonones flexurales. Por último, para un valor más alto del acoplo, se observa que el sistema alcanza un punto crítico más allá del cual la constante de rigidez adquiere formalmente valores negativos, reflejando una inestabilidad todavía mayor del sistema de muchos cuerpos. A través del cálculo de las funciones respuesta relevantes para el sistema de fonones, se ha podido caracterizar en términos físicos las dos últimas fases. Así, se ha visto que el régimen con autoenergía compleja corresponde a la desintegración de fonones en excitaciones con un carácter híbrido de electrón-fonón, resultantes del fuerte acoplo entre ambos tipos de grados de libertad. Además, se ha demostrado que el punto crítico con constante de rigidez nula corresponde a la divergencia de las correlaciones del campo de curvatura de la membrana metálica. Esto se ha podido interpretar a su vez como la señal de la condensación de dicho operador, abriendo una vía para explicar la fenomenología de las arrugas que se forman espontáneamente en las muestras de grafeno suspendido en el vacío.

En el estudio de los efectos de muchos cuerpos en el sector electrónico, se ha emprendido una investigación numérica del sistema de cuasipartículas de Dirac características del grafeno, interaccionando con la parte escalar del potencial electromagnético. En esta tarea, se ha empleado una teoría de campos gauge en el retículo, tomando una malla cúbica para representar las variables de espacio-tiempo y adoptando una formulación de fermiones “staggered” como forma eficiente de llevar a cabo las simulaciones numéricas sobre el sistema. Esta elección ha mostrado ser particularmente conveniente a la hora de preservar la simetría quiral así como la invariancia frente a paridad e inversión temporal de la teoría original, estableciendo un punto de partida ideal para investigar la ruptura dinámica de estas simetrías por efecto de la interacción de Coulomb. A tal fin, se han realizado extensas simulaciones de tipo Monte Carlo en el retículo, destinadas principalmente a determinar las susceptibilidades de los parámetros de orden que reflejan la apertura de una brecha de energía en el espectro. Los resultados numéricos han mostrado en particular el diferente carácter de la ruptura dinámica de la simetría quiral en comparación con la de paridad. Así, la susceptibilidad que caracteriza a la primera ha mostrado ser positiva, mientras que la correspondiente a la segunda ha resultado tener el signo opuesto, típico de una respuesta diamagnética. En ambos casos, se ha encontrado un comportamiento en función de la constante de acoplo que es consistente con una transición de Kosterlitz-Thouless, es decir, mostrando un punto de inflexión en vez de un pico en la susceptibilidad. Se han llevado a cabo un gran número de barridos (hasta medio millón) para un número de diferentes simulaciones de Monte Carlo independientes (hasta 36 para las redes más grandes) con el fin de poder determinar con precisión la posición de los puntos de inflexión. Además, se han realizado los cálculos para diferentes tamaños de red, desde 6^3 hasta 10^3 , para poder realizar un análisis de tamaño finito de las susceptibilidades. Esto ha hecho posible obtener una estimación relativamente precisa del punto crítico correspondiente a la ruptura de la simetría quiral, a partir de unos resultados numéricos que siguen razonablemente bien la hipótesis de escala de tamaño finito. La simulación de la susceptibilidad señalando la ruptura de paridad se ha visto afectada por fluctuaciones mucho mayores en torno del régimen crítico, exigiendo por tanto un conjunto mucho más grande de datos para poder determinar con precisión el punto crítico. En cualquier caso, los resultados obtenidos hasta el momento permiten confirmar que el acoplo crítico para este último patrón de ruptura de simetría debería ser el más bajo, reflejando por tanto el dominio de la fase con condensación de la masa de Haldane sobre la fase con una condensación de excitones convencional. Las estimaciones de los acoplos críticos resultan estar por debajo del valor máximo que puede alcanzar el acoplo nominal de la interacción en muestras de grafeno suspendido en vacío, dejando abierta la posibilidad de observar la fase con brecha de energía bajo condiciones adecuadas que permitan aproximarse a semejante valor máximo del acoplo.

FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR A MUY BAJA TEMPERATURA

Átomos y moléculas condensados o en redes ópticas.

Analizamos la formación de moléculas ultrafrías mediante el uso de resonancias de Feshbach inducidas por campos magnéticos en un sistema fermiónico. Desarrollamos un formalismo de campo medio que incorpora las interacciones de apareamiento y los pares de Cooper como predecesores de las moléculas en el lado “BCS” de la resonancia, y lo aplicamos al caso de formación de moléculas en onda p ($l=1$). Mostramos la relevancia de varios parámetros experimentales (densidad, temperatura, campo magnético inicial y ritmo de variación del mismo) para determinar el número de moléculas formadas.

Simulación cuántica y metrología cuántica.

Propusimos una implementación de un simulador cuántico de la ecuación de Dirac en 2+1 dimensiones mediante átomos fermiónicos atrapados en un retículo óptico. Este procedimiento es más flexible que anteriores propuestas, y también permite analizar la relación entre deformaciones de la red hexagonal y la aparición de campos de gauge efectivos. Por otro lado, en el campo de la metrología cuántica, propusimos un método interferométrico (“multi-pulse quantum interferometry”) para medir pequeñas variaciones en la fase de un tren de pulsos láser mediante su interacción con uno o más iones atrapados. Como ejemplo de especial relevancia, aplicamos este protocolo a la medida de la variación de la fase en un peine de frecuencias. También estudiamos un sistema modelo formado por un ión atrapado y una molécula polar, y analizamos las perspectivas de usar el ion como sonda para medir el momento dipolar eléctrico de la molécula.

Campos medios jerárquicos.

La aproximación de campos medios jerárquicos propuesta inicialmente para el estudio problemas de magnetismo cuántico, fue extendida a sistemas bosónicos en redes ópticas. Para ello introducimos un mapping canónico que transforma operadores de creación o destrucción bosones físicos en productos cuadráticos de bosones compuestos que representan configuraciones de clusters en la red. Este mapping preserva los elementos matriz los operadores físicos cuando se impone una restricción tipo hard-core sobre los bosones compuestos.

En una primera aplicación tratamos el modelo de Bose-Hubbard en una red cuadrada mapeándolo a bosones compuestos que representan plaquetas de dimensión 2×2 . El Hamiltoniano de bosones compuestos resultante fue estudiado en la aproximación de Hartree-Bogoliubov generalizada dando lugar a la teoría de campos de bosones

compuestos (CBMFT). En esta aproximación obtuvimos un diagrama de fases que reproduce en forma precisa los resultados de Monte Carlo cuántico para la transición aislante de Mott a superfluidez. Este formalismo permite estudiar también los modos colectivos de baja energía. En particular, estudiamos cómo las excitaciones de partícula y agujero degeneradas a lo largo de una línea de densidad 1 en la fase de Mott van a cero en el punto crítico de la transición al superfluido. A partir de este punto, uno de los modos se convierte en un boson de Goldstone de energía cero y el otro en el boson de Higgs cuya energía aumenta al internarnos en el superfluido. El comportamiento del boson de Higgs fue recientemente medido en in red óptica de dos dimensiones (Nature 487, 455 (2012)). La descripción teórica de estos modos produce un ajuste notable de los puntos experimentales como se observa en la figura (Phys. Rev. Lett. 111 (2013) 045701).

El formalismo desarrollado en este trabajo se puede aplicar a problemas de bosones en redes ópticas con interacciones de largo rango o con campos sintéticos de gauge para los cuales otras aproximaciones de muchos cuerpos presentan serias dificultades.

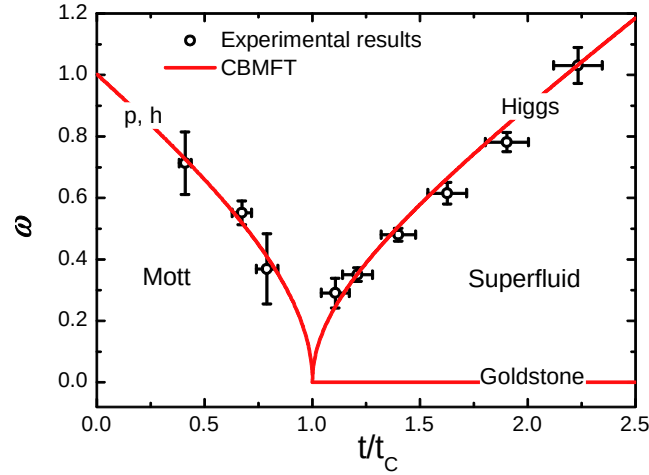


Figure 2: Modos degenerados partícula (p) y agujero (h) a lo largo de la línea de simetría p-h en la fase de Mott y modos de Higgs y Goldstone en la fase superfluida. Resultados experimentales extraídos de Nature **487**, 455 (2012).

GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

Durante 2013 hemos continuado con el estudio de cosmologías inhomogéneas en el marco de la Cosmología Cuántica de Lazos, prestando especial atención al tratamiento de perturbaciones cosmológicas alrededor de universos homogéneos e isotrópos como éste en el que vivimos, en primera aproximación. Más específicamente, hemos presentado una cuantización completa de un universo aproximadamente homogéneo e isótropo con pequeñas perturbaciones escalares en el caso en el que el contenido de materia es un campo escalar mínimamente acoplado y las secciones espaciales son planas y compactas. La cuantización se ha llevado a cabo siguiendo las líneas desarrolladas por nuestro grupo en trabajos previos para topología esférica. Hemos truncado la acción del sistema a segundo orden en las perturbaciones, y fijado la libertad de gauge local en el nivel clásico, aunque hemos estudiado diferentes gauges y demostrado que con todos ellos se infieren conclusiones equivalentes. Por otra parte, hemos considerado también descripciones en términos de cantidades invariante de gauge. Hemos demostrado que el sistema obtenido por reducción de esta manera admite una estructura simpléctica, y su evolución dinámica está dictada por una ligadura hamiltoniana. A continuación, hemos procedido a cuantizar la geometría de fondo con técnicas de lazos, a la vez que hemos adoptado una representación de Fock para las inhomogeneidades. Esta última representación ha sido seleccionada por criterios de unicidad propuestos por nuestro grupo en el contexto de teoría cuántica de campos en espacio-tiempos curvos. Estos criterios determinan también un escalado particular de las perturbaciones. En nuestra cuantización híbrida, que combina métodos de lazos y de Fock, hemos representado la ligadura hamiltoniana como un operador en el espacio de Hilbert cinemático. Si se impone esta ligadura, y si el modo cero del campo escalar se interpreta como un tiempo relacional, un ansatz adecuado para la dependencia de los estados físicos en los grados de libertad de lazos conduce a una ecuación de onda cuántica para la evolución de las perturbaciones. Alternativamente, las soluciones a la ligadura cuántica se pueden caracterizar por sus datos iniciales sobre una sección de volumen mínimo. Las consecuencias físicas de este modelo se están discutiendo en la actualidad, con el fin de comprobar si son compatibles con las observaciones cosmológicas.

Un punto importante en nuestra cuantización híbrida es la posibilidad de seleccionar una representación de Fock única para los campos perturbativos mediante ciertos criterios que nuestro grupo ha introducido en los últimos años. Estos criterios consisten en los requisitos de (i) la invariancia del vacío bajo las simetrías espaciales de las

ecuaciones de campo y (ii) la aplicabilidad de la dinámica como una transformación unitaria en la teoría cuántica. En el caso de perturbaciones cosmológicas, los campos que describen las inhomogeneidades pasan por un período inflacionario que puede ser entendido como la propagación en un fondo de Sitter. Con esta motivación, hemos demostrado que, bajo el escalado conforme estándar utilizado en cosmología, un campo sin masa en el espacio-tiempo de Sitter admite una cuantización de Fock $O(4)$ -invariante tal que la evolución temporal se implementa efectivamente de forma unitaria, y además que esta cuantización es esencialmente única. Este resultado refuta afirmaciones aparecidas anteriormente en la literatura. También hemos discutido la relación entre esta cuantización privilegiada con dinámica unitaria y la basada en la familia de estados invariantes $O(4)$ de tipo Hadamard dados por Allen y Folacci, así como con la que se basa en el vacío de Bunch-Davies, habitual en cosmología inflacionaria.

Por otra parte, hemos demostrado la solidez de los criterios para la selección de una cuantización de Fock única de campos escalares de tipo Klein-Gordon en escenarios no estacionarios con secciones espaciales compactas, permitiendo también diferentes descripciones de los campos que se relacionan por medio de ciertas transformaciones canónicas lineales y no locales. Más concretamente, hemos considerado transformaciones que no mezclan modos propios del operador de Laplace-Beltrami, que se supone que están desacoplados de forma dinámica. Transformaciones canónicas de este tipo se encuentran en el estudio de las perturbaciones escalares en cosmologías inflacionarias, al relacionar, por ejemplo, los grados de libertad física de estas perturbaciones después de una fijación de gauge con cantidades invariantes de gauge. Por lo tanto, nuestros resultados tienen implicaciones inmediatas para nuestra cuantización híbrida de las perturbaciones escalares en Cosmología Cuántica de Lazos. Hemos caracterizado todas las posibles transformaciones del tipo considerado y hemos mostrado que, independientemente de la descripción inicial de campo, nuestros criterios de invariancia bajo la simetría espacial y de una dinámica unitaria conducen de hecho a una cuantización de Fock única, módulo transformaciones unitarias que no afectan a las predicciones físicas.

Otra de las cuestiones que hemos analizado en detalle en el contexto de la Cosmología Cuántica de Lazos es la resolución de singularidades. Recordemos que uno de los fenómenos más notables de la Cosmología Cuántica de Lazos es que, al menos para los modelos cosmológicos homogéneos, el Big Bang se reemplaza con un Big Bounce que conecta nuestro universo con una rama anterior sin pasar por una singularidad cosmológica. Por primera vez en la literatura, hemos estudiado la existencia de singularidades en Cosmología Cuántica de Lazos incluyendo inhomogeneidades, y hemos comprobado que el comportamiento obtenido en el caso puramente homogéneo sigue siendo válido. Hemos centrado nuestra atención en las cosmologías de Gowdy con ondas gravitacionales linealmente polarizadas y hemos utilizado dinámica efectiva para llevar a cabo el análisis. Para el modelo cosmológico considerado, hemos demostrado que todas las posibles singularidades cosmológicas se evitan por los efectos de la cuantización de lazos, logrando así una generalización de los resultados acerca de la resolución de singularidades a este escenario con falta de homogeneidad. También hemos probado que, si se produce un rebote en el volumen (del fondo homogéneo), las inhomogeneidades aumentan el valor de ese volumen en el rebote.

Asimismo, hemos identificado huellas de efectos cuánticos gravitatorios que sobreviven desde el universo primitivo hasta la época actual: las fluctuaciones de los campos cuánticos vistos por observadores comóviles son sensibles a la historia del universo primitivo. La existencia (o no) de un rebote cuántico deja una traza en el ruido cuántico de fondo que no se atenúa y que no sería despreciable, ni siquiera hoy. Hemos estimado una cota superior a la energía típica a la que los efectos cuánticos son relevantes. También hemos presentado el problema de autoacoplo de gravitones en detalle y hemos resuelto el problema de infinitas interacciones asociado, complementando así resultados previos referentes a la recuperación de la Relatividad General en este esquema. Hemos concluido que, mientras se requiera la preservación de la invariancia gauge, se recupera de forma natural la estructura de la Relatividad General, pero en una versión que muestra explícitamente un espaciotiempo minkowskiano de fondo al estilo de Rosen.

Durante este último año, por otra parte, también hemos desarrollado líneas de investigación de geometría cuántica y anómala. Gianluca Calcagni ha dedicado todo el 2013 a consolidar una clase de modelos de espaciotiempos multi-escala donde la geometría del universo tiene las propiedades típicas de los multi-fractales. Los objetivos han sido: 1) desarrollar una teoría coherente que pueda explicar analíticamente algunas características universales de espaciotiempos que aparecen en muchos modelos independientes de gravedad cuántica, 2) desarrollar su fenomenología, especialmente la de teoría clásica y cuántica de campos y de cosmología, 3) verificar su viabilidad experimental. Los objetivos 1) y 2) han sido alcanzados totalmente y hemos aclarado mucho la estructura fundamental de estas geometrías, sus propiedades en presencia de una curvatura métrica y sus consecuencias cosmológicas para el universo primigenio y la constante cosmológica, mientras que 3) está todavía en fase de estudio. En paralelo, Calcagni ha trabajado sobre cosmologías de universo de brana y no-conmutativos y sobre geometrías anómalas y el cálculo de la dimensión espectral en varios enfoques, incluidos teoría de cuerdas, “asymptotic safety”, agujeros negros, gravedad cuántica de lazos y una teoría super-renormalizable de gravedad cuántica propuesta por L. Modesto y otros, para la cual hemos encontrado soluciones cosmológicas con rebote.

Dentro del estudio de aspectos generales sobre teoría cuántica de campos se ha dedicado especial atención al estudio del formalismo hamiltoniano para modelos definidos en regiones espaciales acotadas. La importancia inmediata de estos modelos en el contexto de la gravedad cuántica reside en el hecho de que el tratamiento habitual de los agujeros negros en Gravedad Cuántica de Lazos se lleva a cabo mediante la introducción de horizontes aislados; un tipo de fronteras interiores para el espacio tiempo en las que se imponen condiciones de contorno naturales que dan lugar a un tipo de horizonte casi-local. El problema principal que se presenta a la hora de tratar estos sistemas es el de la interpretación de estas condiciones sobre la frontera, en particular averiguar si se trata de ligaduras en el sentido habitual y su tipo (primera o segunda clase) –del que depende críticamente su tratamiento cuántico.

Desde un punto de vista técnico la presencia de fronteras nos obliga a utilizar un esquema matemático más elaborado que el que se obtiene al generalizar de manera formal el método tradicional de Dirac utilizado para el estudio de sistemas lagrangianos singulares. El contexto apropiado para el estudio de este tipo de sistemas en presencia de fronteras viene dado por los métodos geométricos desarrollados para este fin por Gotay, Nester y Hinds. Estos autores desarrollaron un esquema geométrico preciso (que para el caso particular del estudio de teorías de campos se apoya en el uso de variedades diferenciales de dimensión infinita modeladas sobre espacios de Banach) que se adapta perfectamente al tipo de problemas que nos interesa. Hay que señalar que desde el punto de vista técnico el trabajo con variedades de dimensión infinita requiere del uso de técnicas de análisis funcional que introducen importantes dificultades matemáticas.

Durante el año 2013 se ha conseguido poner en marcha un ambicioso programa de trabajo sobre este tema que se ha materializado en el estudio completo y sistemático de modelos de campos escalares con diversas condiciones de contorno (de tipo Dirichlet y Robin) y de campos de Maxwell (con condiciones de tipo conductor perfecto y Neumann). El trabajo realizado ha dado lugar a una publicación en *Classical and Quantum Gravity* (en colaboración con Jorge Prieto y Eduardo Sánchez Villaseñor) que ha aparecido en enero de 2014. En el momento actual se están extendiendo los resultados obtenidos a modelos en interacción (campos escalares y Yang-Mills) y modelos en los que se espera que de forma natural haya grados de libertad físicos asociados a las fronteras (Maxwell-Chern-Simons en 2+1 dimensiones).

Dentro del contexto de la Gravedad Cuántica de Lazos y la Cosmología Cuántica de Lazos es importante entender las consecuencias físicas de la introducción de espacios de Hilbert no separables. Para ello se han considerado en la literatura diversos tipos de modelos, en particular el oscilador armónico polimérico, y se han estudiado algunas características del espectro de la versión polimérica del hamiltoniano. Durante el año pasado conseguimos una caracterización precisa de este. El resultado más importante que obtuvimos fue determinar que el espectro genérico de los hamiltonianos poliméricos para el oscilador es un espectro de bandas (como el de los sólidos) pero puramente puntual (y por tanto asociado a verdaderos autovalores). Los resultados obtenidos han dado lugar a una publicación en *Classical and Quantum Gravity* (en colaboración con Jorge Prieto y Eduardo Sánchez Villaseñor). En el momento presente estamos explorando las consecuencias de los resultados obtenidos en Cosmología Cuántica de Lazos así como proponiendo alternativas a los espacios de Hilbert no separables de uso habitual.

Finalmente se ha dedicado un esfuerzo considerable al estudio de problemas combinatorios utilizando los métodos de funciones generatrices puestos a punto durante los últimos años en el estudio de la entropía de agujeros negros en Gravedad Cuántica de Lazos. El trabajo realizado se ha concentrado en el estudio completo de una importante clase de recurrencias lineales que generaliza a las que definen importantes familias de números combinatorios que incluyen a los números de Euler, Stirling, Ward, Lah etc. Ha dado lugar a dos trabajos (en colaboración con Jesús Salas y Eduardo Sánchez Villaseñor de la Universidad Carlos III de Madrid) que se encuentran sometidos al lento proceso de revisión propio de las revistas de matemáticas (*Journal of Combinatorial Theory, Series A*).

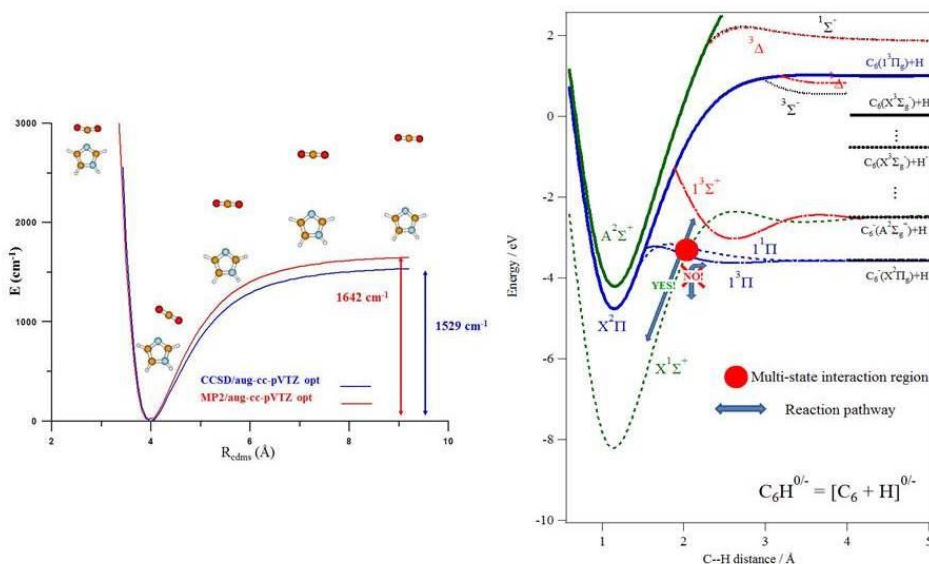
QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA Y AL ESTUDIOS DE NUEVOS MATERIALES

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

Durante el año 2013 hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en tres sub-líneas de investigación: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas y determinación de secciones eficaces en colisiones inelásticas no reactivas a muy bajas temperaturas. Empleamos siempre, como herramienta básica, métodos ab initio de alto nivel para determinar estructuras moleculares y superficies de energía potencial. A partir de estas y de nuestros códigos rovibracionales ENEDIM y FIT-ESPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Con cálculos de dinámica molecular close-coupling determinamos propiedades colisionales a partir de las superficies de Van-der-

Walls. Todos los sistemas son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias.

Desde 2004, hemos realizado estudios muy detallados y completos dirigidos a la caracterización de cadenas carbonadas de importancia astrofísica aumentando progresivamente la complejidad de los sistemas estudiados. Estas cadenas se consideran relevantes tanto como especies aisladas como intermediarios de reacciones de formación de grandes moléculas como son los PAHs o los fulerenos. Para caracterizar cadenas de pequeño tamaño, se han empleado métodos muy precisos. Inicialmente estudiamos cadenas puras tipo C_n con un número de átomos n reducido ($n=4,5$). Estas especies que no tienen momento dipolar permanente son susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo. En el infrarrojo lejano se pueden observar a través de sus movimientos de flexión. Durante 2013, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_7 en colaboración con investigadores de la Universidad King Saud de Ryad. También hemos estudiado los procesos de formación de los aniones tipo $C_nX_m^-$ ($X=N, H$) recientemente detectados en regiones circunestelares. Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son observables mediante radioastronomía. Teniendo en cuenta la evolución de los estados electrónicos de baja energía a lo largo de los procesos de formación y destrucción de dichos aniones, hemos propuesto una regla general que permite predecir la detectabilidad de los aniones en fuentes astrofísicas. Para todas las cadenas carbonadas estudiadas, se han caracterizado estructuras isoméricas; se han calculado superficies de potencial para los primeros electrónicos estados electrónicos, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización así como intersecciones cónicas y efectos rovibrónicos.



Los nuevos observatorios radioastronómicos van a permitir detectar nuevas moléculas y nuevas variedades isotópicas siempre y cuando se conozcan sus espectros en las regiones milimétrica y submilimétrica. Los cálculos ab initio altamente correlacionados permiten determinar las estructuras de mínimo de dichas moléculas así como obtener conjuntos iniciales de parámetros espectroscópicos que pueden facilitar la asignación de dichos espectros. Especial interés tiene el cálculo para caracterizar espectroscópicamente especies prebióticas no-rígidas que presentan niveles vibracionales susceptibles de estar poblados a muy bajas temperaturas y que se pueden detectar en estados vibracionales excitados en zonas de formación estelar. Este año 2013, se ha prestado atención especial a las variedades isotópicas monosustituidas del propano y del dimetil eter. El propano es una especie básica para comprender la química de la atmósfera de Titán. El dimetil eter es una molécula interestelar muy abundante. Hemos iniciado también estudios de especies orgánicas que contienen azufre como el sulfuro de dimetilo o el tioetanol.

Por último y dentro del entorno de la Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, estamos realizando estudios de la interacción del CO_2 y del agua con imidazoles. Se trata de predecir la capacidad de materiales tipo ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) para la captación de residuos atmosféricos. Los cálculos moleculares (potenciales de interacción y estructuras) se aprovecharán en estudios posteriores de simulación de sólidos.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Espectroscopía sobre superficies.
- Óptica y Fotónica.
- Fotónica de plasmones superficiales y metamateriales.
- Bioespectroscopía.
- Físico-Química de los procesos de deposición y ablación.
- Aplicaciones biológicas de la espectroscopía vibracional.

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.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas): Raman y fluorescencia.
- Metamateriales en el dominio óptico.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Espectroscopía de plasmas de ablación inducidos por radiación láser infrarroja.
- Espectroscopía de ruptura dieléctrica en plasmas inducidos por láser (LIBS).
- Identificación de marcadores espectroscópicos infrarrojos y Raman para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas y neoplásicas.
- Estructura molecular de proteínas y lípidos en alimentos funcionales.

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 y 3.
- Diseño mecánicas 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.
- Espectroscopía infrarroja (Normal, FTIR, micro IR y SEIR).
- Espectroscopía infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía visible-UV.
- Espectroscopía de fluorescencia.
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de barrido (SEM).
- Física teórica (Electrodinámica Clásica) y cálculos numéricos.
- Espectroscopía infrarroja (FTIR).
- Espectroscopía de ruptura dieléctrica (LIBS).
- Espectroscopía Raman (FT1, normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía óptica de emisión (OES).
- Fluorescencia inducida por láser (LIF).
- Deposición asistida por láser.
- Análisis estadístico multivariante.

LABOR INVESTIGADORA:

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

ESTUDIOS DE LA SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$

(Proyecto FPA2009-07387 y FPA2012-32443 (doctorando JAE-predoc. M. Carmona-Gallardo))

Uno de los objetivos de nuestro grupo es el estudio experimental de la sección eficaz de la reacción nuclear ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$. La importancia astrofísica de esta reacción es doble. En primer lugar juega un papel determinante en la predicción del flujo de neutrinos solares puesto que dentro de los parámetros nucleares de entrada del *Modelo Solar Estándar* la sección eficaz de esta reacción supone una de las mayores fuentes de incertidumbre. En segundo lugar es una reacción relevante en la Nucleosíntesis del Big-Bang Concretamente es determinante a la hora de resolver el problema de la abundancia del ${}^7\text{Li}$ primordial en el universo.

Nuestro grupo ha estudiado la sección eficaz de esta reacción a energías intermedias usando dos técnicas experimentales diferentes. El primer experimento fue realizado en el Centro de Microanálisis de Materiales de Madrid mediante la *Técnica de Activación*, consistente en la deposición del ${}^7\text{Be}$ en placas de cobre. La sección eficaz de la reacción se estima a partir de la detección de la emisión γ retardada procedente de los iones depositados en las placas (M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)). Los resultados resuelven las discrepancias existentes entre medidas anteriores y corroboran los primeros cálculos ab-initio sobre esta reacción realizados por T. Neff (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

En el segundo experimento se utilizó la técnica de *Detección Directa* del ${}^7\text{Be}$. En este caso la sección eficaz se determina a partir del conteo directo de los núcleos de ${}^7\text{Be}$. El experimento fue realizado usando el espectrómetro DRAGON situado en TRIUMF. DRAGON es un separador de masas que dispone de dipolos magnéticos y eléctricos que permiten seleccionar el ion de interés (${}^7\text{Be}$) y separarlo del haz que no interacciona (${}^4\text{He}$) antes de detectarse en el DSSSD situado en el plano focal del separador.

Se han realizado medidas complementarias requeridas para poder extraer la sección eficaz total de la reacción. Por una parte, puesto que en el separador se selecciona un solo estado de carga de los iones de ${}^7\text{Be}$, se ha estudiado la distribución de estado de carga de iones de Be atravesando un blanco gaseoso de ${}^3\text{He}$. Además se ha determinado el perfil del blanco gaseoso mediante la reacción de resonancia ${}^3\text{He}({}^{12}\text{C},p\gamma){}^{14}\text{N}$. Por último, la distribución angular de los iones producidos es ligeramente superior a la aceptación geométrica del separador, por lo la transmisión de los iones a través de DRAGON se ha obtenido mediante la adaptación y el uso del código de simulaciones GEANT3-DRAGON. A partir de estas medidas experimentales y las simulaciones se ha determinado la sección eficaz a cuatro energías intermedias.

El estudio de la sección eficaz de esta reacción nuclear constituye el trabajo de tesis de Mariano Carmona Gallardo que será defendida en la primavera de 2014.

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

(Proyecto FPA2009-07387 y FPA2012-32443 (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. La tesis doctoral de G.Ribeiro está enfocada análisis de este experimento, en concreto en los núcleos más allá de la línea de goteo de neutrones. En este último año ha estado explorando el núcleo no-ligado ^{13}Be que se produce de la reacción entre el haz de ^{14}B y el blanco de protones antes mencionado. En este tipo de experimentos de física nuclear se utiliza la técnica de cinemática completa, lo que quiere decir que se registran todos los parámetros de energía, tiempo y posición posibles tanto del haz entrante como de los fragmentos dispersados tras el blanco. Para garantizar la detección de los núcleos más allá de la línea de goteo de neutrones, como el ^{13}Be , es necesaria este tipo de técnica, ya que la vida media de estos isótopos es tan breve que no es posible detectarlos directamente, sino que debemos reconstruir su composición a partir de las señales que dejan sus productos de desintegración.

El estudio de este tipo de resonancias aporta información sobre fenómenos exóticos que aparecen en los límites de la carta de núcleos como los estados no-ligados, los halos o en algunos casos nuevos números mágicos. Los resultados de este análisis permitirán comprobar algunos de los estados que se han sugerido en publicaciones recientes.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DIPOLAR DE NÚCLEOS LIGEROS

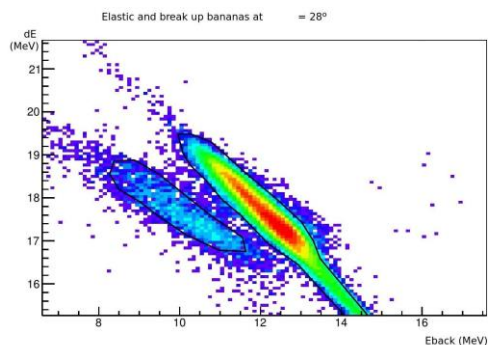
Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear reciente ha sido la existencia de un halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad (línea de goteo). Un estado de halo es consecuencia de un fenómeno umbral que resulta de la presencia de estados 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 ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2 \text{ fm}$), 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 (ve la memoria 2012) y tomado nuevos datos con el experimento S1202, los avances se explica en la continuación.

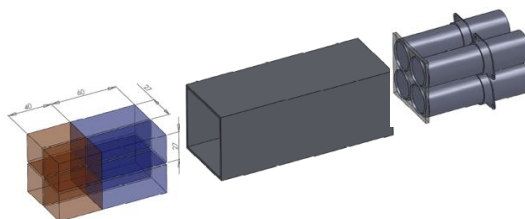
EXPERIMENTO S1202: ESTUDIOS DEL EFECTO HALO EN LA DISPERSIÓN DE ^{11}Be CON UN BLANCO PESADO

(Proyecto FPA2012-32443 (Contratado doctorando Vicente Pesudo))

En este experimento se estudia la reacción del núcleo halo ^{11}Be contra blancos de plomo y oro. 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. Esta dificultad no deja de añadirle interés, ya que se trata del único núcleo halo con un estado excitado ligado y por tanto además de las secciones eficaces de dispersión elástica y ruptura, resulta interesante el estudio de la dispersión inelástica en sí misma. Tras el experimento sobre blanco de plomo (^{208}Pb) en 2012, en el verano de 2013 se llevó a cabo el experimento sobre blanco de oro (^{197}Au) y se han analizado los resultados en el rango angular más relevante.



En la figura se ve demostrada la energía depositada en los dos detectores en serie (dE y E respectivamente) que nos permiten diferenciar dispersión elástica y ruptura.



INSTRUMENTACIÓN PARA FAIR: AVANCES EN LA DETECCIÓN DE PROTONES DE ALTA ENERGÍA EN R3B

(Proyecto ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333, FPA2009-07387 (Dr. E. Nácher, Prof. O. Tengblad, A. Perea, Dr. José Sánchez del Río)

En el grupo trabajamos en el diseño, simulación y construcción de un calorímetro para radiación gamma y protones que se instalara en la instalación futura FAIR. La parte frontal de este calorímetro recibirá radiación y partículas cargadas de muy alta energía puesto que en las reacciones nucleares a energías relativistas los productos de la reacción salen principalmente hacia delante. Esta parte frontal, *Forward Endcap*, es responsabilidad de nuestro grupo, y en años anteriores hemos avanzado en el diseño y la implementación de los sub-detectores que lo formarán. Durante el año 2013 hemos contado con un prototipo ya bastante cercano a lo que será una celda del detector final. Le llamamos CEPA4 y consta de 4 detectores de centelleo individuales, formados cada uno de ellos por dos cristales: LaBr₃ y LaCl₃ acoplados ópticamente. El aspecto del detector lo podemos ver en la *Figura 1*.

En marzo de 2013 pudimos testear la respuesta de nuestro detector con protones de alta energía (hasta 230 MeV). Lo hicimos utilizando un ciclotrón de última generación recientemente instalado en Kracovia para aplicaciones médicas. En la *Figura 2* podemos ver, por primera vez, un espectro donde representamos un espectro correspondiente a protones incidentes de 220 MeV que atraviesan nuestro detector por completo. El pico a la derecha son los protones bien separados del fondo y de los sucesos que han producido neutrones neutrones en nuestros cristales. Estos datos están ahora acabándose de analizar y se publicaran pronto.

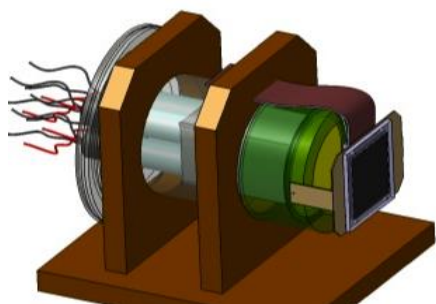


Figura 1. Arriba: desglose de los 4 cristales de CEPA4 y sus fotomultiplicadores. Abajo: diseño del montaje experimental con un detector de silicio DSSD enfrente de CEPA4.

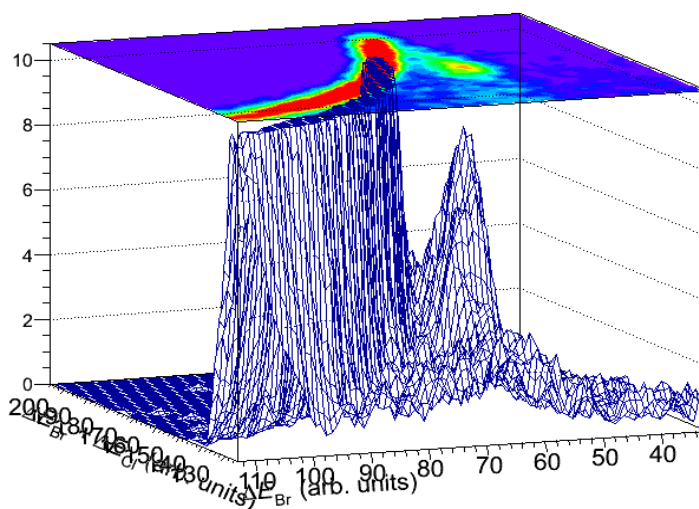


Figura 2. Representación gráfica de los protones de 220 MeV. En el plano horizontal se representa la energía depositada en el LaBr₃ frente a la depositada en el LaCl₃. El eje Z es el número de protones detectados

FORMACIÓN DE TÉCNICO EN EL ÁMBITO 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 MJ. 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*.

EXPERIMENTOS NP1012-RIBF49R1: ESPECTROSCOPIA GAMMA EN HAZ DE LOS ISÓTOPOS RICOS EN NEUTRONES DE Ni CON EL ESPECTRÓMETRO DALI2 EN RIKEN (JAPÓN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01)

El experimento NP1012-RIBF49R1 ha sido realizado con el fin de estudiar los núcleos ricos en neutrones $^{73,74,75}\text{Ni}$, a solo tres a cinco neutrones del núcleo doblemente mágico ^{78}Ni . A lo largo de la cadena de los isótopos de Ni se espera que el relleno del orbital $g_{9/2}$ conlleve una polarización del núcleo a causa de la interacción espín-isoespín. Las consecuencias son elevadas probabilidades de transición electromagnéticas, $B(E2)$, indicando colectividad cuadrupolar. Para estudiar este mecanismo, hemos realizado un experimento de excitación Coulombiana a energías intermedias usando el espectrómetro DALI2 y un haz cóctel de $^{73,74,75}\text{Ni}$ proporcionado por el espectrómetro BigRIPS para medir la probabilidad de transición reducida, $B(E2)$, del estado fundamental al primer estado excitado 2^+ .

EXPERIMENTOS NP1112-RIBF87, NP0702-RIBF26R1, NP1112-RIBF86 Y NP1112-RIBF80: ESPECTROSCOPIA DE DESINTEGRACIÓN DENTRO DEL PROYECTO EURICA EN RIKEN (JAPÓN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01)

En el año 2012 el proyecto EURICA (Euroball-RIKEN Cluster Array) comenzó su andadura en la instalación de haces radiactivos (Radioactive Beam Factory - RIBF) en RIKEN (Japón). Dentro de este proyecto se dispone de doce detectores de Ge, los cuales previamente habían sido utilizados por la comunidad científica europea de estructura nuclear (incluyendo el grupo del IEM) tanto como parte del espectrómetro gamma en $4\pi\text{EUROBALL}$, como posteriormente en el proyecto RISING en el GSI. Estos detectores se han enviado e instalado en la instalación RIBF en RIKEN. La idea subyacente del proyecto es aprovechar las incomparables intensidades de los haces radiactivos exóticos, proporcionados por el complejo de aceleración emplazado en RIKEN combinado con el separador de fragmentos BigRIPS, para llevar a cabo la espectroscopia del desintegración (tanto de estados isoméricos como de la desintegración beta) en las regiones de la tabla de nucleídos que nunca antes habían sido accesibles para este tipo de estudios. En 2013 hemos participado en la segunda campaña experimental de EURICA dedicada al estudio tanto de isótopos ricos en neutrones en las regiones alrededor de los núcleos doblemente mágicos ^{78}Ni y ^{132}Sn como de isótopos ricos en neutrones de Zr, Mo y Nd.

ESPECTROSCOPIA DE DESINTEGRACIÓN DEL NUCLEO DOBLEMENTE MÁGICO ^{100}Sn EN RIKEN (JAPÓN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01)

En Junio de 2013 se realizó un experimento dedicado al estudio detallado de las propiedades de desintegración de ^{100}Sn , el núcleo doblemente mágico más pesado con igual número de protones y neutrones que podemos estudiar. Este núcleo muy deficiente en neutrones se ha producido en la fragmentación de un haz de ^{124}Xe en un blanco de Be. Después ha sido separado e identificado en el separador de alta resolución BigRIPS del RIBF en RIKEN. En un experimento anterior, realizado en el GSI (Darmstadt, Alemania) en 2008, se había medido el valor $\log(ft)$ de la desintegración beta de ^{100}Sn hacia ^{100}In (la desintegración Gamov-Teller de un protón $g_{9/2}$ hacia un neutrón $g_{7/2}$), que resulta ser el valor más pequeño conocido hoy en día en la tabla de nucleídos (C. Hinke et al., Nature 486 (2012) 341). En el presente experimento, 2035 iones de ^{100}Sn han sido identificados correspondiente a un factor diez más en estadística comparado con el experimento del GSI. Esperamos poder determinar valores más precisos de la vida media de ^{100}Sn y de la energía máxima de su desintegración. Además intentaremos identificar el estado isomérico 6^+ en ^{100}Sn que ha sido predicho desde hace mucho tiempo. Finalmente, los nuevos datos permitirán obtener información muy detallada sobre las propiedades de desintegración de un gran número de isótopos alrededor de ^{100}Sn .

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 33K 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 sustrato 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 2013 hemos iniciado la modelización numérica de algunos aspectos de las nanoestructuras carbonosas mediante el uso de nuevas técnicas de densidad de funcional aptas para interacciones dispersivas. La necesidad de dicha extensión hacia técnicas numéricas más exactas se ha evidenciado al no poder reproducir algunos de los comportamientos que hemos observado experimentalmente utilizando solamente métodos efectivos puramente “clásicos”.

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 relacionada con la candidatura española a la fuente de espalación de neutrones europea. 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. Las actividades en curso estuvieron 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 de ese 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 2013 se realizó la revisión tanto del diseño técnico del sistema blanco como del sistema de cuadrupolo de radio-frecuencia por los correspondientes comités científicos internacionales oficiales recibiendo en ambos casos excelentes valoraciones.

ESPECTROSCOPIA EN PLASMAS DE ABLACIÓN INDUCIDOS POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Las propiedades de la pluma que acompaña a la ablación con láser pulsado de Fluoruro de litio (LIF) condiciones de vacío medio (4 Pa) fueron estudiadas por una combinación de espectroscopia de emisión óptica resuelta espacial y temporalmente. El plasma inducido por un láser de CO_2 a intensidades que van desde 0,18 hasta $4,7 \text{ GW} \times \text{cm}^{-2}$ fue encontrado fuertemente ionizado con presencia de especies F^+ , Li^+ , F^{2+} y F^{3+} y rico en átomos neutros de litio y flúor. Se estudió el comportamiento temporal de átomos excitados de Li y de las especies ionizadas F^+ , Li^+ , F^{2+} y F^{3+} . Los resultados muestran un decaimiento más rápido de la emisión continua y de las especies iónicas Li^+ , F^{3+} y F^{2+} que en el caso de F^+ y átomos neutros de Li. Las distribuciones de la velocidad de especies atómicas e iónicas se obtienen a partir de mediciones de tiempo de vuelo. La densidad de electrones y la temperatura de excitación en el plasma inducido por el láser se estimaron a partir del análisis de los datos de espectro obtenidos con diversos

retrasos respecto al láser de CO₂. A partir del decaimiento de la intensidad de Li⁺, H⁺, F²⁺ y F³⁺ con el tiempo de retardo, hemos estimado las constantes de recombinación electrón-ion a tres cuerpos para estas especies.

Hemos 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. Se obtuvo un material vítreo semejante a las fulguritas naturales mediante irradiación, con un láser continuo de CO₂, de un mortero de cal-pozolana en condiciones de vacío medio y a presión atmosférica. Se encontró que las muestras alcanzaban en su superficie temperaturas superiores a la de fusión (1556 K) por lo que la superficie se funde y se transforma en un vidrio amorfo cuando se enfría. Las muestras se estudiaron combinando las espectroscopías de Ruptura Dieléctrica y Raman. La emisión inducida por la irradiación del láser es principalmente debida a la relajación electrónica de especies como Na, K, Si, Si⁺, Ca, O, N y CaOH junto con un intenso continuo debido a la emisión del cuerpo negro. La emisión inducida, tanto en fulguritas naturales como inducidas, es principalmente debida a la relajación electrónica de Ca, Ca⁺, Si, Si⁺, Si²⁺, Si³⁺, H, Na, K, Mg, N, O, CaOH y OH. Los espectros Raman del material vítreo son similares a los de las fulguritas naturales, siendo la mayor diferencia entre ellas la formación de portlandita sobre la superficie del mortero. Según se incrementó la potencia del láser se formaba SiO₂ vítreo con más unidades Q₄ y Q₁ presentes.

Se ha investigado la evolución espacio-temporal del plasma producido por un láser pulsado de CO₂ de alta potencia en monóxido de silicio (SiO) mediante espectroscopia de emisión óptica (OES) y métodos de diagnóstico por imágenes. El plasma formado se encuentra fuertemente ionizado y rico en silicio neutro, átomos de oxígeno y muy débiles bandas moleculares de SiO. Se registraron mediante espectroscopía de emisión óptica perfiles 2D integrados y resueltos en el tiempo en función de la longitud de onda y la distancia desde la muestra. Algunas líneas de emisión del silicio se han empleado para deducir la densidad de electrones durante la expansión del plasma. Las intensidades relativas de dos líneas de Si²⁺ se han utilizado para calcular la evolución temporal de la temperatura del plasma.

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. Martín (IQFR).

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

Se ha aplicado la espectroscopía infrarroja y Raman para identificar las sustancias biológicas correspondientes a los marcadores espectroscópicos detectados previamente en plasma de sangre periférica para el diagnóstico de la enfermedad de Alzheimer. Parte de los marcadores se pueden describir en términos de aumento de la relación globulinas/albumina, en particular aumento de la concentración de α -globulinas (α_1 -antitripsina, α_1 -antiquimotripsina, α_2 -macroglobulina), β -globulinas, γ -globulina, transferrina y ubiquitina, y aumento de la concentración de péptidos A β -amiloides. Se ha determinado un protocolo adecuado de recogida y procesado de muestras de sangre periférica en diversos centros hospitalarios para su posterior análisis infrarrojo y Raman con el objetivo de validar el método de diagnóstico de la enfermedad de Alzheimer.

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 infrarroja para determinar las estructuras de geles de emulsiones de aceite de oliva en agua y su correlación con las respectivas propiedades reológicas. Estas emulsiones gelificadas con harina de chia tienen mayor cohesividad cuando se estabilizan con alginato o gelatina, debido a la penetración de las pequeñas gotas de emulsión en el interior de la red del respectivo gel.

NANOFABRICACIÓN

Se ha potenciado la línea de trabajo relacionada con la fabricación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas avanzadas con vistas a sus posibles aplicaciones espectroscópicas y catalíticas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que den lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales que dan lugar a la formación de cavidades interpartícula altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Durante el año 2013, se ha profundizado 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, mediante el estudio experimental de la modificación de las características morfológicas en función de las condiciones experimentales aplicadas. El estudio detenido de nanoestrellas de plata se debe a que estas nanopartículas presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias

de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. Por otra parte, el ensamblaje de NPs se ha llevado a cabo empleado como moléculas bifuncionales los ditioles (tanto alifáticos como aromáticos) y diisocianuros 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 continuado siendo una línea importante en nuestro grupo durante 2013. 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.

En estos experimentos de funcionalización se han empleado ciclodextrinas y cucurbituriles orientados hacia la detección de pesticidas altamente insolubles en agua. Estos sistemas presentan una cavidad hidrofóbica interna dentro de la cual pueden alojarse moléculas difíciles de detectar por SERS.

En otros experimentos de funcionalización de NPs se ha desarrollado en profundidad el análisis del ensamblaje de NPs inducido por ditioles alifáticos y aromáticos. Estas moléculas bifuncionales desempeñan una doble función: a) el acoplamiento de nanopartículas con la formación de espacios interpartícula de gran intensificación de campo, y b) la creación de cavidades intermoleculares que permiten el ensamblaje de analitos. La detección de analitos es entonces posible pues éstos se concentran en las cavidades interpartícula donde la intensificación del campo es máxima. Respecto a estas sustancias se ha estudiado el ensamblaje de NPs mediante resonancia de plasmón y microscopía TEM. También se han aplicado NPs de plata y de oro en la detección de pesticidas organoclorados como endosulfán, aldrina, dieldrin y lindano, determinándose la sensibilidad y especificidad de estas detecciones tras análisis de las isotermas de adsorción. 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).

Asimismo, se ha llevado a cabo 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). Estas moléculas se han empleado en la caracterización de la actividad SERS de superficies de Ag obtenidas por deposición mediante láser pulsado (PLD) cedidas por investigadores del Instituto de Óptica.

INMOVILIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS EN SOPORTES DE INTERÉS CATALÍTICO

Durante el año 2013 se han iniciado experimentos conducentes a la inmovilización de nanopartículas de Ag y Au en sustratos empleados en experimentos catalíticos. Estos ensayos persiguen como objetivo fabricar soportes dopados con nanopartículas plasmónicas, para mejorar la manipulación de las mismas y emplearlas en aplicaciones tanto espectroscópicas como catalíticas. En este sentido se han empleado los siguientes materiales: sílice mesoporosa, carbón activo, y óxidos metálicos de Ti, Ce, Al y Zr. Estos estudios se han realizado también en colaboración con investigadores de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón).

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Durante el año 2013 se ha proseguido con la investigación de la interacción de moléculas biológicas con nanopartículas metálicas de Ag y Au. Este estudio persigue también la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular. Gran parte de estas investigaciones se han realizado gracias al proyecto i-LINK del CSIC concedido recientemente en colaboración con investigadores de la Universidad de Paris XIII (Francia). Concretamente se ha llevado a cabo un estudio de interacción de los péptidos terapéuticos somatostatina, tanto cíclica como lineal, y octreotido. En estos péptidos se ha investigado en profundidad el efecto de la adsorción sobre metales sobre el enlace disulfuro. Y se ha estudiado el mecanismo de interacción con la superficie.

Durante este año se ha estudiado también el péptido β -amiloide, el cual está relacionado con el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer. Previamente, se ha llevado a cabo la caracterización vibracional del colorante tioflavina mediante espectroscopia SERS y SEF. Este colorante es capaz de interaccionar con proteínas amiloides

permitiendo la detección del β -amiloide y péptidos relacionados en pequeñas cantidades, lo que permitiría la detección precoz de esta enfermedad.

Se ha dedicado una especial atención al 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. Para llevar a cabo esta investigación se han empleado diferentes técnicas espectroscópicas: Raman, SERS, Fluorescencia, dicroísmo circular, UV-visible, así como diferentes técnicas de microscopía. 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 de origen natural que presentan una alta luminiscencia. En este terreno se ha realizado un estudio estructural y dinámico de sustancias polifenólicas procedentes de las sustancias húmicas y melaninas resultantes de procesos de digestión inducidos por hongos. En particular, se ha avanzado en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. Se ha llevado a cabo una 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 las Universidades 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 del pigmento parietina, presente en los líquenes de la especie *Xanthoria parietina*, que también presenta propiedades antitumorales. Este último estudio ha consistido en la investigación de su espectro a diferente pH mediante fluorescencia, SERS y UV-visible.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS

Se ha estudiado la formación de complejos de diferentes fármacos con supramoléculas transportadoras, los cucurbituriles. Por otro lado se ha iniciado el estudio de nuevos sistemas transportadores de fármacos complejos, de tamaño micrométrico, basados en la inclusión de nanopartículas de plata con el medicamento en los nanoporos de un polímero sintético biodegradable y biocompatible, el PBS. El estudio se ha llevado a cabo en estructuras porosas de diferente tamaño. Las técnicas usadas para la caracterización en ambos casos han sido espectroscopias de fluorescencia y Raman y amplificadas, SEF y SERS. Los fármacos utilizados en el estudio han sido los anti-inflamatorios no esteroideos ketorolaco, indometacina y piroxicam y el antitumoral emodina, con los que ya se tiene experiencia en el laboratorio.

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

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

Se han estudiado las condiciones óptimas experimentales para la obtención de espectros Raman dispersivo, FT-Raman y SERS del colorante malva sintetizado en el Metropolitan Museum of Art de Nueva York. En el caso del Raman dispersivo se emplearon láseres a 633 y 785 nm. En el espectrómetro FT-Raman se estudiaron muestras de malva en polvo y en disolución de metanol. En ninguno de los casos anteriores consiguió obtener un espectro Raman. Solamente se obtuvieron espectros intensos con la técnica SERS. Las condiciones experimentales estudiadas fueron la longitud de onda de excitación, el pH y la naturaleza del agregante. Por otra parte se realizó una separación de los diversos componentes del colorante por cromatografía en capa fina (TLC) para realizar la identificación de los mismos por medio de la obtención de espectros SERS directamente sobre la placa cromatográfica. Por último se llevó a cabo la caracterización estructural de la molécula mauveine A, uno de los componentes principales del malva con ayuda de técnicas de química computacional DFT. Se realizó también el análisis vibracional de dicha molécula. Este trabajo se llevó a cabo en colaboración con el Dr. Marco Leona, del Metropolitan Museum of Art de Nueva York.

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. Se está aplicando la técnica SERS en la detección de posibles pigmentos de naturaleza orgánica en tintas de coloración amarilla y rosada, y también la posible presencia de extracto de azafrán en tintas de color negro para explicar su mejor conservación ante la degradación con el tiempo.

por la humedad. 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 aplicado también la espectroscopía Raman a la caracterización de aditivos moleculares orgánicos tradicionales y comerciales utilizados en materiales de construcción de interés para el Patrimonio Histórico. Mientras que los aditivos tradicionales (huevo, azúcares, etc) presentan estructuras conocidas, las estructuras de los aditivos comerciales son muy complejas, al ser mezcla de varios compuestos y por lo tanto de difícil interpretación. La modificación del proceso de hidratación de los ligantes tradicionales con diferentes aditivos se ha estudiado por espectroscopía Raman, analizando las diferentes formas polimórficas del CaCO_3 originadas por la presencia del aditivo. Con respecto a los aditivos comerciales se sigue trabajando en la obtención de los espectros SERS de los mismos para su posterior identificación en materiales endurecidos.

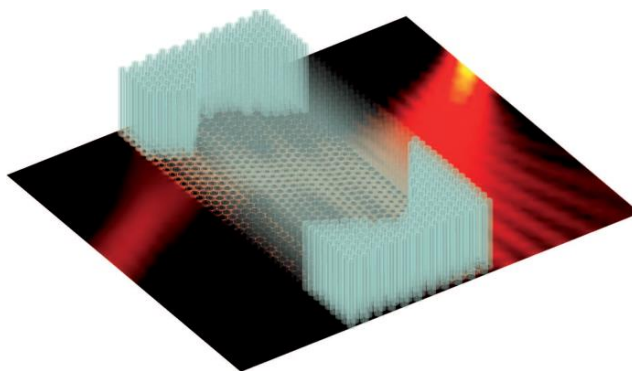
La valorización de residuos de las plantas potabilizadoras de agua y de la industria papelera como materia prima para la obtención de nuevos materiales se realiza en colaboración con el Departamento de Síntesis, Caracterización y Reciclado de Materiales del Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja del CSIC. En el caso de la utilización de pulpa de papel se han identificado a través de espectroscopia Raman nuevas fases cristalinas tipo hidrotalcitas.

Finalmente, se está trabajando en colaboración con el grupo de Espectroscopía de Plasmas de Ablación de este Departamento en la obtención de vidrios sintéticos (fulguritas) en materiales de construcción de base silicio mediante la aplicación de Láseres continuos y pulsados y su posterior identificación mediante técnicas de ablación láser (LIBS) y espectroscopía Raman. Resultados preliminares muestran que irradiando con láseres continuos de CO_2 se generan fulguritas de composición análogas a las que aparecen en la naturaleza.

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

METAMATERIALES ÓPTICOS CON ÍNDICE NEGATIVO Y BAJAS PÉRDIDAS

Recientemente, se han demostrado experimentalmente muchas de las fascinantes propiedades ópticas predichas para metamateriales (refracción negativa, *superlensing*, invisibilidad,...). Desafortunadamente, es sumamente complicado trasladar los mejores logros en esta línea, producidos en el régimen de microondas, al dominio óptico (luz), debido a los problemas tecnológicos de escalado de los materiales y a las dificultades conceptuales. Particularmente importante para conseguir Metamateriales Ópticos con índice negativo (NIMs, del inglés) es el reto de conseguir simultáneamente respuestas intensas eléctrica y magnética, con bajas pérdidas. Con este fin, hemos propuesto nanohilos híbridos metal-semiconductor como bloques constituyentes de NIMs ópticos. El metamaterial obtenido de esa manera, altamente isótropo en el plano normal a los nanohilos, presenta un índice de refracción negativo en el infrarrojo cercano, con valores de la parte real incluso por debajo de -1 , y pérdidas extremadamente bajas (un orden de magnitud mejores que los NIM ópticos presentes). El régimen espectral operativo en el que se pueden conseguir índices negativos abarca todo el espectro de las telecomunicaciones. El diseño ha sido probado numéricamente en configuraciones tales como prismas y láminas (ver figura), observando directamente el fenómeno de refracción negativa.



FOTOLUMINISCENCIA DE NANOHILOS SEMICONDUCTORES

Hemos desarrollado un modelo teórico sencillo para explicar la fotoluminiscencia de nanohilos semiconductores individuales, con especial énfasis en la direccionalidad e intensificación de la emisión de luz polarizada. Los nanohilos se comportan como nanoantenas ópticas eficientes, con características de emisión determinadas por el material y por su geometría y dimensiones. Se demuestra que la potencia radiada está gobernada por el acoplo de la emisión dipolar a modos guiados o *leaky* del nanohilo, que dependen de la frecuencia y diámetro, mientras que la longitud del nanohilo determina el tamaño de la cavidad (tipo Fabry-Perot) donde dichos modos se propagan y

rebotan con sus correspondientes vectores de onda. 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).

NANOHILOS METÁLICOS INVISIBLES

Hemos demostrado mediante un estudio teórico que es posible construir cableado eléctrico transparente. En el trabajo, se comprueba que un cable conductor de plata de dimensiones submicrométricas puede ser prácticamente transparente a la radiación infrarroja empleada en telecomunicaciones cuando el conductor metálico es recubierto adecuadamente con un semiconductor como el silicio. En el artículo, una de cuyas figuras fue seleccionada por la Sociedad Americana de Óptica (OSA) como “imagen de la semana”, se demuestra que, con un diseño adecuado, estos nanocables metálicos pueden ser más transparentes que una lámina de dimensiones nanométricas de vidrio ordinario. Dadas las actuales posibilidades de fabricación, es posible que en un futuro cercano puedan integrarse sistemas electrónicos y ópticos de forma más compacta al no interferir la funcionalidad óptica con la electrónica. En consecuencia, podrá aumentarse la eficiencia de dispositivos tales como células fotovoltaicas y chips de uso en telecomunicaciones por fibra óptica, entre otras prometedoras aplicaciones.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- 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.
- Estudio y caracterización espectroscópica de filosilicatos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Métodos computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL.
- Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía visible de emisión de plasmas.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- Espectroscopía Raman lineal.
- 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, SISTEMAS ASTROFÍSICOS 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 y de otros sistemas astronómicos. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Mediante una cámara de alto vacío y un criostato refrigerado por He en circuito cerrado podemos alcanzar hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2013.

Dentro de nuestra línea de investigación con tendencia astrobiológica, y después del estudio de las moléculas de glicina y alanina, descritos en detalle en Memorias precedentes, hemos centrado nuestra atención en moléculas que pueden formar parte de los procesos químicos de formación o reacción de los aminoácidos citados. En concreto, hemos estudiado los iones de cianato, bicarbonato y carbamato por medio de espectroscopía de infrarrojo, y hemos discutido las posibles interacciones entre ellos y las implicaciones astrofísicas de los resultados. Para el análisis de los espectros experimentales hemos utilizado cálculos químico-cuánticos de las especies citadas. Citaremos únicamente dos ejemplos. Las muestras generadas mediante “hyperquenching” (congelación súbita de gotas de solución), constituyen buenos modelos de hielos astrofísicos compactos, pudiendo estudiarse en el laboratorio en un amplio rango de temperaturas. La reacción espontánea de creación de bicarbonato en soluciones de cianato en agua, que tiene lugar a temperatura ambiente, sería extremadamente lenta en nubes interestelares, pero podría acelerarse mediante radiación externa en núcleos de nubes difusas, o por calentamiento en cuerpos que se aproximen al sol; nuestros estudios nos han permitido proponer unas especificaciones adecuadas para la observación de este ion en medios astrofísicos. Por último, dentro de este apartado se está comenzando a caracterizar minerales tales como los filosilicatos, los cuales tienen una fuerte presencia en cuerpos celestes.

En colaboración con otros grupos, hemos realizado dos estudios centrados en hielos de CO₂ y H₂O. En uno de ellos (conjunto con investigadores de la Universidad de British Columbia en Vancouver) se han predicho espectros de IR en las condiciones de las capas altas de la atmósfera de Marte, en las que agua y dióxido de carbono pueden formar aerosoles de distinta concentración, fase y forma. En el otro, en colaboración con el grupo de Guillermo Muñoz Caro, en el CAB, se ha estudiado en detalle el proceso de cristalización de CO₂ en condiciones muy exigentes de alto vacío y baja velocidad de crecimiento del hielo de CO₂. La espectroscopía de IR refleja la existencia de una banda de vibración de CO₂ amorfo, que desaparece al cristalizar, ya sea mediante aumento de temperatura o mediante acumulación de monocapas. Por comparación con observaciones astrofísicas, se concluye que hasta la fecha no se ha detectado la existencia de hielo amorfo de dióxido de carbono puro en ningún sistema astronómico.

Por otra parte, hemos publicado un primer trabajo de obtención de constantes ópticas en el infrarrojo próximo y medio mediante programas específicamente desarrollados en nuestro grupo. Se ha aplicado a sistemas de interés astrofísico, hielos de NH₃ y mezclas NH₃/N₂, utilizando nuestros espectros en ambas zonas espectrales. Estamos convencidos de que este artículo recibirá importante atención en este área, dadas las manifestaciones que la comunidad astrofísica ha realizado repetidamente sobre la necesidad de constantes ópticas en la región del IR medio y cercano para la interpretación de las observaciones espectrales.

En la parte atmosférica, se ha concluido el estudio teórico de las propiedades termodinámicas y cinéticas 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 en ambientes marinos que finalmente generan aerosoles. Esta investigación ha sido realizada en colaboración con el grupo del Dr. Alfonso Saiz-López del Instituto de Química Física “Rocasolano” del CSIC y el Prof. John Plane de la Universidad de Leeds. Nuestro estudio teórico se ha completado además con un estudio experimental en la U. de Leeds que apoya los resultados obtenidos, y que ha permitido que, a través de nuestros cálculos, se pueda proponer un mecanismo para la polimerización de estos compuestos. Además se ha comenzado a estudiar en las zonas del infrarrojo medio y lejano el aerosol atmosférico descrito como polvo mineral, el cual está compuesto básicamente por filosilicatos tales como esmectitas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 nm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio y yeso.

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

Hemos continuado nuestros estudios previos sobre la cinética de plasmas fríos de $H_2 + N_2$ y los hemos extendido a proporciones muy bajas de N_2 . Estos estudios, realizados en descargas de cátodo hueco y basados esencialmente en medidas de espectrometría de masas de neutros y iones, nos han permitido obtener condiciones con muy distinto peso relativo de los tres iones protonados relevantes (H_3^+ , N_2H^+ , y NH_4^+). Mediante un modelo cinético del plasma hemos podido analizar en detalle las cadenas de transferencia protónica entre estas tres especies y el predominio general de NH_4^+ . Este ion, formado a partir de las pequeñas cantidades de amoníaco producido en las paredes del reactor, es mayoritario incluso para abundancias relativas de NH_3 del orden del 1%. La gran estabilidad del NH_4^+ frente al H_2 y a la mayoría de las pequeñas moléculas más habituales en el medio interestelar sugiere que puede ser relativamente abundante en el espacio. El amonio nunca se había detectado en el medio interestelar debido a la ausencia de momento dipolar de la especie completamente protonada, pero existía una posibilidad de observar sus variantes deuteradas. Con este fin, hemos colaborando en las medidas encaminadas a la mejora de la determinación experimental de la frecuencia rotacional 10-00 del NH_3D^+ , para cuya producción hemos usado también un plasma frío generado en una descarga de cátodo hueco. Los nuevos datos han permitido la identificación del ion en el medio interestelar (véase línea de “espectroscopía láser” de este departamento). Los resultados obtenidos, junto con los de otros estudios previos, han sido presentados en una Conferencia Plenaria impartida en la International Conference on Phenomena in Ionized Gases (31st ICPIG) y en una Conferencia Invitada en la International Conference on Research and Application of Plasmas. Plasma 2013.

Por otro lado, se ha puesto a punto un método de diagnóstico de densidades y energías de iones en plasmas de hidrógeno, basado en la comparación entre medidas de espectrometría de masas de iones y del ensanchamiento de las líneas $H\alpha$ de la serie de Balmer del hidrógeno atómico, observado por espectroscopía de emisión visible de alta resolución.

En colaboración con el grupo de “Transient plasmas in planetary atmospheres” del Instituto de Astrofísica de Andalucía del CSIC, y a partir de medidas espectroscópicas de emisión de N_2 y N_2^+ en plasmas de laboratorio con aire a baja presión, se han puesto a punto varios métodos de estimación de la temperatura del gas en eventos transitorios luminosos (TLEs) como Halos y Sprites, que tienen lugar en la estratosfera terrestre por encima de las tormentas, y se ha evaluado cuál de ellos resulta más fiable en los distintos casos.

Se ha iniciado una serie de experimentos dedicados a la generación de películas carbonadas y partículas de polvo mediante plasmas de radiofrecuencia con mezclas de He y CH_4 . En colaboración con el Laboratorio de Hielos de nuestro departamento, se ha caracterizado la naturaleza de las películas depositadas sobre muestras de silicio mediante espectroscopía IR por Transformada de Fourier (FTIR) y posteriormente se han irradiado las películas formadas con haces de electrones de 2 keV y con radiación UV, a fin de observar posibles cambios en sus enlaces. Los resultados obtenidos hasta el momento se expondrán en una charla invitada en Faraday Discussion 168: Astrochemistry of Dust, Ice and Gas, que tendrá lugar en Leiden (Holanda) en abril de 2014.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Las investigaciones llevadas a cabo hasta la fecha sobre la reactividad del muonio (Mu) con H_2 se han recapitulado en un artículo de revisión (topical review). En él se comparan resultados clásicos y cuánticos y se discute en detalle el papel de la energía de punto cero, del efecto túnel y de la adiabaticidad vibracional en la dinámica reactiva de este sistema.

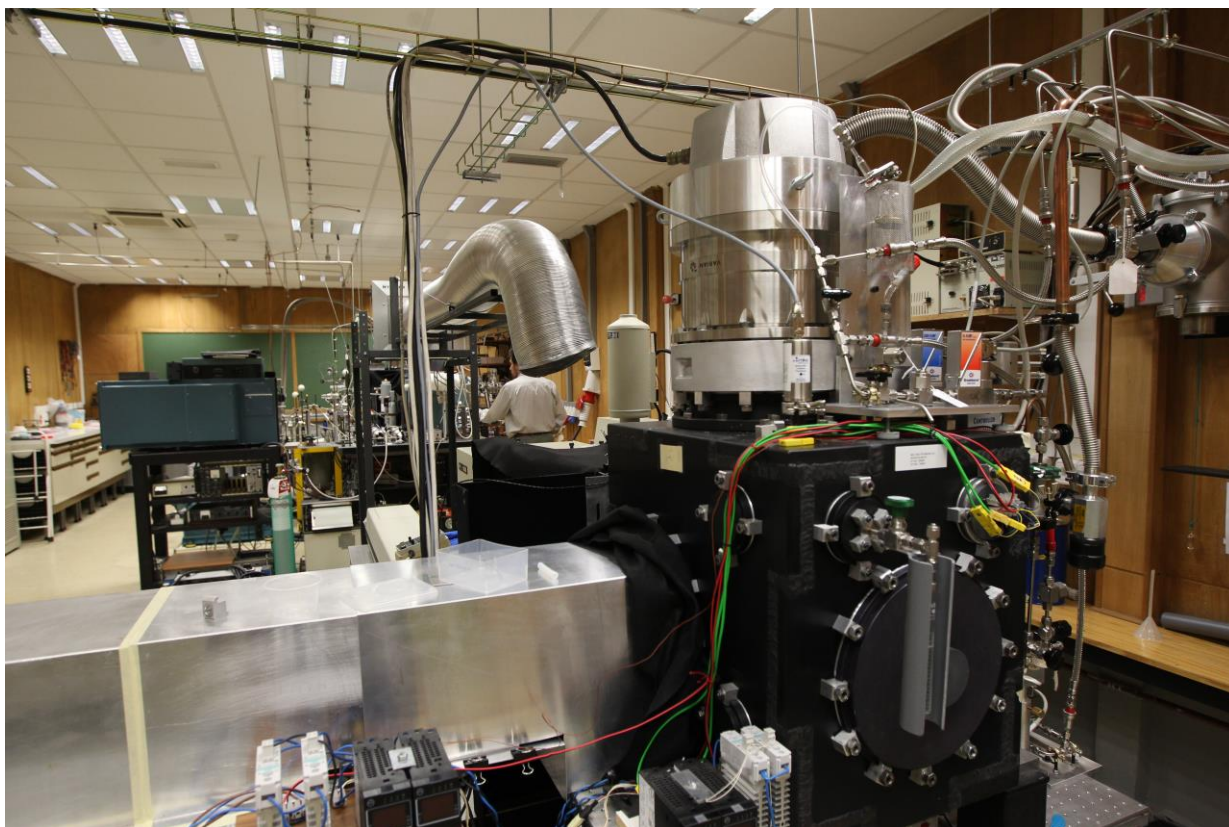
También se ha estudiado el efecto de la excitación vibracional en la reacción $S^+ + H_2(v) \rightarrow SH^+ + H$ y sus posibles implicaciones astrofísicas. Se obtuvieron coeficientes cinéticos resueltos en vibración utilizando el método de trayectorias quasiclásicas (QCT). La reacción es endotérmica y muy lenta para los estados vibracionales $v=0-1$ pero la velocidad aumenta órdenes de magnitud cuando $v > 1$. La utilización de los coeficientes cinéticos calculados en este trabajo en modelos astrofísicos muestra que la reacción estudiada podría ser una de las fuentes principales de SH^+ en entornos interestelares como las regiones dominadas por fotones (PDRs).

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

El grupo de Fluidodinámica Molecular está especializado en el estudio cuantitativo de los flujos de fluidos fuera del equilibrio. Durante 2013 ha continuado con el estudio de estos flujos en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el

régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una especie de tierra de nadie donde escasean los datos experimentales, los modelos teóricos suficientemente rigurosos, y los métodos de cálculo eficientes. 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.

En la actualidad 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 veinte años. Una (A) está adaptada a la producción de chorros de gases y líquidos desde toberas criogénicas, y la otra (B), a la producción de chorros gaseosos de sustancias líquidas desde toberas calientes.



“Laboratorio de fluidodinámica molecular”

En la instalación (A) se han realizado dos series de experimentos sobre oxígeno, aprovechando el grupo de bombeo específico para este gas adquirido recientemente: i) expansiones de mezclas de O_2 en He, al 2,5%, 10% y 50% desde una tobera a temperatura ambiente, con el propósito de medir la relajación rotacional de O_2 por colisiones inelásticas con He; ii) expansiones de mezclas de O_2 en He, al 0,5%, 2%, y 5% desde toberas enfriadas a 63 y 75 K, encaminadas a la producción de dímeros y otros pequeños agregados de O_2 . En estos últimos experimentos se han alcanzado temperaturas tan bajas como ~ 2 K, que han permitido observar por primera vez la relajación entre los niveles del triplete de estructura fina de espín electrónico, separados tan sólo por 2 cm^{-1} .

Con el fin de estudiar las colisiones inelásticas $H_2O:H_2$ y $H_2O:D_2$, de gran interés astrofísico, se han medido en la instalación (B) varias series de espectros Raman de chorros supersónicos de *para*- H_2 , *normal*- H_2 , *orto*- D_2 y *normal*- D_2 puros, y de mezclas muy diluidas de H_2O (gas) en dichos gases, desde una tobera de 350 micras a 363 K, empleando el nuevo sistema evaporador-mezclador instalado recientemente. Se ha comprobado que todos estos chorros están libres de condensación de H_2O , requisito imprescindible para el análisis cuantitativo de la cinética colisional, que se encuentra en curso en la actualidad.

Se ha continuado con el análisis de las colisiones $H_2O:He$ y $H_2O:H_2O$ a partir de la evolución temporal de las poblaciones rotacionales de H_2O (gas) en chorros supersónicos, obtenidas mediante espectroscopía Raman. A diferencia de otros sistemas como O_2 o N_2 estudiados previamente por nuestro grupo, en el caso del H_2O se observa que la población de los niveles rotacionales más energéticos se aparta progresivamente de la distribución

Boltzmann, afectando notablemente a la dinámica colisional. Además, ello complica el análisis colisional porque impide definir una “temperatura” rotacional, lo que obliga a trabajar con las poblaciones rotacionales individuales. Nuestras medidas han permitido determinar unos coeficientes de transferencia promediados para colisiones $\text{H}_2\text{O}:\text{H}_2\text{O}$ para los 8 primeros niveles de *orto*- H_2O a 100 K, incalculables hoy en día por métodos teóricos, y se han empleado para validar los coeficientes de transferencia nivel-a-nivel $\text{H}_2\text{O}:\text{He}$ calculados por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones del Instituto de Física Fundamental del CSIC, con el que se trabaja en estrecha colaboración.

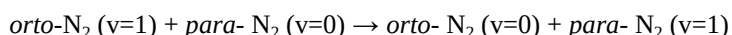
Por otra parte, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania), se ha continuado el análisis e interpretación de los espectros Raman de microchorros líquidos (filamentos) de mezclas de *para*- H_2 y *orto*- D_2 (al 1%, 3%, 5%, 9%, 17%, 52%, 84%, y 96%). Estos filamentos, de unas 5 micras de diámetro, se enfrían en vacío por evaporación superficial, obteniéndose líquido altamente subenfriado por debajo del punto de fusión, hasta que finalmente solidifican. Los espectros Raman de estos filamentos a distintas distancias axiales permiten seguir el proceso de cristalización con una resolución temporal de ~ 10 ns. Así, se ha comprobado que la cristalización de *para*- H_2 y *orto*- D_2 se retrasa notablemente por pequeñas cantidades de impurezas isotópicas, un efecto de naturaleza cuántica no observado anteriormente.

Por último, en el apartado computacional, se han recalculado las tasas de colisión inelástica nivel-a-nivel de la molécula de H_2 y se han calculado por primera vez las de D_2 y HD en todas sus variantes isotópicas entre 20 y 300 K. Con ellas se han verificado, sobre datos experimentales de absorción ultrasónica, las ecuaciones de relajación desarrolladas con anterioridad en el laboratorio, validándose las tasas del sistema H_2 , D_2 , y HD, así como la superficie de energía potencial empleada en su cálculo.

ESPECTROSCOPÍA LÁSER

Se han llevado a cabo estudios espectroscópicos de alta resolución, mediante el uso de la técnica de espectroscopía Raman estimulada, en varias especies moleculares:

- 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 molécula. Con anterioridad se utilizó esta técnica, para el estudio detallado de la transición $v=2 \leftarrow v=1$ y obtención de los parámetros moleculares que caracterizan el estado superior. Ahora se ha proseguido el experimento para determinar la tasa de transferencia vibracional debida a colisiones, entre las variedades de spin nuclear *orto*- y *para*- N_2 . Se excitó un único nivel rotacional del estado $v=1$ de *orto*- N_2 y tras retrasos controlados se observó la evolución de la población de *para*- N_2 en dicho estado. Puesto que la transformación directa *orto* $\rightarrow$ *para*, no es posible por colisiones en la escala de tiempos y presiones utilizados, toda la población presente, que evoluciona desde cero hasta su valor de equilibrio, es imputable a colisiones:



De la evolución temporal de las poblaciones relativas de ambas variedades de spin nuclear se dedujo la tasa de transferencia de energía vibracional, debida a colisiones, para la molécula de N_2 . Los experimentos se realizaron inicialmente a la temperatura de 77K. En el futuro se extenderá la medida a otras temperaturas y se explorará, la posibilidad de subir otro peldaño en la escalera vibracional, de $v=1$ a $v=2$.

- $\text{C}_2\text{H}_2 - \text{N}_2$
Se ha determinado el ensanchamiento colisional de las líneas de la rama Q de la banda ν_2 de la molécula de acetileno perturbada por N_2 . las medidas se realizaron a 150K y temperatura ambiente y se utilizaron para validar algunas superficies de potencial de este par, mediante modelos semiclásicos de ensanchamiento colisional, siendo la concordancia bastante satisfactoria dentro de los errores experimentales.
- Espectroscopía Raman en fibras huecas de cristal fotónico (HCPCF)
Se ha concluido este experimento, demostrando una magnificación de la sensibilidad en un factor de 28000 respecto al régimen de foco único, y una relación señal ruido comparable a la alcanzable con la técnica quasi-continua.
- Espectroscopía de iones moleculares
En colaboración con el grupo de plasmas fríos del Departamento, se ha concluido la instalación de una célula de descarga en cátodo hueco con óptica multipaso en el laboratorio de espectroscopía infrarroja por diferencia de frecuencias. El primer sistema que se ha estudiado ha sido el ión amonio deuterado (NH_3D^+). Este trabajo se enmarca en el proyecto Consolider-Astromol CSD2009-00038 del. El ión amonio NH_4^+ es un precursor

fundamental de otras moléculas nitrogenadas y prebióticas en el medio interestelar. No obstante su detección en el espacio mediante radioastronomía no es posible ya que no tiene momento dipolar eléctrico permanente debido a su simetría tetraédrica. La variante deuterada NH_3D^+ sí posee un pequeño momento dipolar (0.26D) y es por tanto susceptible de ser detectada en la región de ondas submilimétricas. Hemos producido el ión NH_3D^+ en el reactor de cátodo hueco, registrado su espectro en una concentración de $\sim 10^{-10} \text{ cm}^{-3}$ y refinado las constantes espectroscópicas de la banda ν_4 , a partir de las cuales hemos podido predecir con gran precisión la frecuencia de la transición rotacional 1_0-0_0 . Esta predicción ha confirmado la detección de NH_3D^+ en Orion IRC y en el objeto B1b, llevada a cabo por colaboradores del equipo ASTROMOL del CAB-CSIC y otras instituciones extranjeras.

Se ha llevado también a cabo la medida de los espectros de vibración-rotación de los iones $^{36}\text{ArH}^+$ y $^{38}\text{ArH}^+$. Cabe destacar que la abundancia natural de ^{36}Ar y ^{38}Ar en la Tierra es de sólo 0.3% y 0.06%. En el espacio, sin embargo, el isótopo más abundante es ^{36}Ar , y recientemente se ha identificado $^{36}\text{ArH}^+$ a partir de datos del satélite Herschel en la nebulosa del Cangrejo. Dado que la misión Herschel ya ha concluido, y la alta opacidad de la atmósfera a las frecuencias a las que la rotación de esta molécula se puede detectar desde tierra, los estudios futuros de ArH^+ en el espacio dependerán de observaciones en el infrarrojo, que se verán facilitadas por nuestros datos de laboratorio.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Control cuántico molecular. Alineamiento y orientación molecular.

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y la orientación de una molécula aislada mediante combinación de pulsos láser y campos estáticos. Se ha demostrado que una sucesión de pulsos láser cuya amplitud aumenta de una manera controlada permite alinear significativamente moléculas en varios estados cuánticos iniciales $|J,M\rangle$, ($J \leq 6$, $M \leq J$) simultáneamente. Esto implica que es posible optimizar el alineamiento de una muestra inicialmente a baja temperatura.

Se ha optimizado el control de la orientación de una molécula dipolar aislada mediante una secuencia optimizada de pulsos láser en presencia de un campo estático débil. Para ello se utiliza la evolución adiabática y/o diabática a través un cruce de cuasienergía con un estado auxiliar seleccionado de alto J . Se ha demostrado el control reversible de transiciones entre el estado orientado y el antiorientado con alta fidelidad. Estos dos estados forman la base para realizar un qubit con moléculas dipolares ultrafrías.

Los desarrollos anteriores se basan en la evolución adiabática del Hamiltoniano de Floquet. Se han obtenido resultados preliminares sobre el uso de esta técnica para desexcitar y alinear coherentemente moléculas en estados iniciales altamente excitados en J con M bajo.

Gases cuánticos ultrafríos

Hemos continuado el estudio del control del alineamiento y orientación de moléculas dipolares en una red óptica en régimen de tight binding. Hemos demostrado que la combinación de control de orientación en cada nodo con la interacción dipolar de largo alcance permite un control preciso del entrelazamiento entre las moléculas. Si el campo en cada nodo es idéntico hay restricciones de simetría. Se ha estudiado el efecto de la ruptura controlada de esta simetría aplicando patrones de intensidad diferente en distintos nodos. Esto permite acceder controladamente a estados antisimétricos y abre nuevas posibilidades de control de entrelazamiento.

Por otra parte, la interacción entre moléculas dipolares fuertemente orientadas depende del ángulo entre la polarización del láser y el eje intermolecular pudiendo pasar de atractiva a repulsiva. Se ha demostrado que la variación adiabática del eje de polarización del campo láser induce cruces entre energías de estados pendulares, permitiendo nuevos mecanismos de control del entrelazamiento molecular.

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.
- Nanoestructuración de sistemas poliméricos.

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 tetradección.
- 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.
- Espectroscopía de rayos X de barrido y transmisión.

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

Relajaciones conformacionales en PET bajo confinamiento

El estudio del confinamiento de la fase amorfa en polímeros semicristalinos ha sido objeto de una estrecha colaboración de nuestro grupo de investigación con el Dr. Marco Pieruccini (CNR Módena, Italia) que comenzó hace ya varios años. Durante 2013, este estudio se ha centrado en las regiones amorfas entre empaquetamientos de laminillas, en inglés “amorphous pockets” (APs), de politereftalato de etileno (PET). Para este estudio se han realizado medidas de dureza utilizando la técnica de microindentación y de espectroscopía dinamo-mecánica (DMS). Muestras de PET fueron cristalizadas desde el estado vítreo a una temperatura baja y otra alta ($T_c = 100^\circ\text{C}$ y 160°C respectivamente) para posteriormente ser recrystalizadas a algunos grados por encima de estas temperaturas. Los estudios de DMS mostraron dos relajaciones segmentales. La relajación más lenta está asociada a las regiones amorfas entre láminas cristalinas que conjuntamente constituyen un apilamiento. La relajación más rápida se relaciona con las regiones amorfas entre apilamientos, APs. Los resultados de DMS obtenidos sugieren que el proceso de recrystalización influye en la cooperatividad dentro de las APs: la recrystalización unos grados por encima de $T_c = 100^\circ\text{C}$ produce un aumento de la cooperatividad y de la barrera de energía libre asociada a los reajustes conformacionales. Paralelamente, los resultados de microdureza en muestras cristalizadas a bajas temperaturas sugieren que el valor promedio de la dureza de las regiones amorfas aumenta después del proceso de recrystalización. Asimismo, se ha discutido la relevancia de la disminución del tamaño de las APs, como consecuencia de la recrystalización, en el aumento de la rigidez de los segmentos moleculares y, como consecuencia, en el aumento de las propiedades mecánicas. En cuanto a las muestras de PET cristalizadas a alta temperatura ($T_c = 160^\circ\text{C}$), los resultados sugieren que la cooperatividad y las propiedades mecánicas disminuyen con la recrystalización. Un posible mecanismo, que podría explicar estas observaciones, es el cambio en el acoplamiento de las cadenas amorfas con los cristales adyacentes.

Aplicación de indentación instrumentada en polímeros: estudio de métodos estándares de análisis

Se ha establecido recientemente una colaboración con grupos de la Universidad Politécnica de Barcelona (Dr. Joan Josep Roa Rovira) y la Universidad Politécnica de Valencia (Dr. Emilio Rayón), para abordar conjuntamente el estudio de la aplicación a polímeros de métodos de análisis de indentación instrumentada. En la actualidad no existe un criterio unánime para dicho análisis ya que es un área de investigación relativamente reciente. El procedimiento más corrientemente empleado se basa en la aplicación de criterios de elasticidad lineal al comienzo de la curva de descarga en un ciclo de indentación. Este método ha sido suficientemente contrastado en cerámicas y metales, y permite derivar valores del módulo elástico y de la dureza, pero presenta ciertas limitaciones en su aplicación a materiales con dependencia temporal. Por otra parte, Loubet y sus colaboradores han desarrollado un método de análisis de indentación instrumentada específico para materiales poliméricos que, conjuntamente con la aplicación de la medida continua de la rigidez del material (CSM, del inglés “Continuous Stiffness Measurements”), ha dado origen a resultados preliminares muy prometedores. El trabajo llevado a cabo en colaboración con los Drs. Roa y Rayón se ha centrado en la comparación de los resultados obtenidos mediante el método de Loubet y aquél basado en el análisis del inicio de la curva de descarga. Las ventajas y desventajas de cada método se analizaron en una gran variedad de materiales termoplásticos, que abarcaron desde polímeros vítreos hasta semicristalinos. La conclusión más interesante fue que la diferencia entre los resultados de ambos métodos dependía de la naturaleza del material y, más concretamente, de la temperatura de transición vítrea.

Nanoindentación en matrices termoplásticas reforzadas con fullerenos inorgánicos

Se ha investigado el efecto de partículas inorgánicas de tipo fullereno (IF-WS₂) sobre dos matrices poliméricas, polipropileno isotáctico (iPP) y polisulfuro de fenileno (PPS), en colaboración con la Prof. Marián Gómez-Fatou y la Dra. Ana Díez Pascual, ambas del ICTP, CSIC, y el Dr. Mohammed Naffakh, de la Universidad Politécnica de Madrid, todos ellos expertos en el área de nanocompuestos poliméricos. Para este estudio se empleó la técnica de nanoindentación junto con el método de CSM. Un análisis detallado de las variaciones de módulo y dureza sugiere que el refuerzo del material se debe principalmente a las propiedades intrínsecas del material de refuerzo y a la interfase con la matriz, y en una menor medida a los cambios inducidos en la nanoestructura de la matriz polimérica al añadir el refuerzo. Se ha puesto de manifiesto que, para el mismo contenido de IF-SW₂, la matriz de PPS se refuerza en mucha mayor medida que la de iPP. Este diferente comportamiento se ha atribuido a distintos mecanismos de deformación, ya que la fase amorfa de iPP se encuentra por encima de la temperatura de transición vítrea a la temperatura de medida ($\approx 22^\circ\text{C}$), mientras que la del PPS está por debajo.

NANOESTRUCTURACION DE MATERIA CONDENSADA BLANDA CON MORFOLOGIAS CONTROLADAS

NANOFABRICACIÓN DE ESTRUCTURAS POLIMÉRICAS

Nanorejillas poliméricas

Hemos continuado explotando las posibilidades de utilización de rayos láser con el fin de nanoestructurar la superficie de películas delgadas de polímeros. En cooperación con el grupo de la Dra. M. Castillejo (IQFR-CSIC) hemos tenido éxito en la nanofabricación inducida por láser de femtosegundo 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). La irradiación produce nanosurcos característicos (nanogratings) con longitudes de período similar a la longitud de onda del láser. La información estructural obtenida 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.

Nanoestructuración de Polímeros por Campos Ópticos Cercanos

En colaboración con el Dr. Jan Siegel, del Instituto de Óptica (IO-CSIC) hemos explotado la aplicación de campos ópticos cercanos para la nanoestructuración de polímeros. Mediante un único pulso de nanosegundos con un láser ultravioleta se puede imprimir en una superficie polimérica una estructura característica debido a la modulación de la intensidad espacial de la distribución de campo cercano creado por una microesfera de sílice depositada en la superficie de la muestra. Nuestros experimentos demuestran que esta nanoestampación en el polímero se debe principalmente a un fenómeno de ablación. Estos experimentos recalcan la utilidad de los campos ópticos cercanos para la nanoestructuración de superficies poliméricas y abren posibilidades para nuevas aplicaciones.

Superficies funcionales para aplicaciones como memorias no volátiles

Hemos explorado el uso de polímeros ferroeléctricos para producir memorias no volátiles con resolución nanoscópica. En este sentido, se han sido preparados nanoestructuras tipo nanorejillas con baja relación de aspecto en nanofilms de copolímeros de poli(fluoruro de vinilideno) y poli(trifluoroetileno) por medio de Nano Litografía de Impresión (Nano Imprint Lithography (NIL)). Mediante el uso de estos nanogratings se puede obtener una mejora en la densidad de escritura y lectura de información de alrededor de 500 Gbit/in² (0,01 bit/nm²) según revelan las medidas de Piezorespuesta con Microscopía de Fuerza (PFM). La investigación estructural, mediante técnicas de difracción de rayos X, indica que el confinamiento físico generado por la nanoimpresión promueve el desarrollo de cristales preferentemente orientados. Nuestros resultados evidencian que la nanoestructuración en una dimensión puede ser un procedimiento útil para mejorar el control de la polarización en películas delgadas de polímeros ferroeléctricos.

Nanohilos poliméricos mediante plantillas de alúmina

Hemos demostrado, mediante microdifracción de rayos X usando radiación de sincrotrón, el carácter heterogéneo de nanohilos unidimensionales con alta relación de aspecto de copolímeros ferroeléctricos de poli (fluoruro de vinilideno-co-trifluoroetileno) y de poli (tereftalato de trimetileno) soportados por una película de polímero residual. Los nanohilos pueden ser preparados por infiltración en membranas de aluminia (AAO) desde el fundido o de disoluciones del polímero. La evolución espacial de los diferentes polimorfos cristalinos de los copolímeros ferroeléctricos indican la existencia de la fase ferroeléctrico puro en los nanohilos para las muestras infiltradas de disolución. Los núcleos de cristal formados en la película de polímero residual juegan un papel clave en la determinación de la formación de un gradiente de distribución de cristalinidad que disminuye a lo largo de las primeras micras en los nanohilos. Estos resultados ponen de manifiesto aspectos clave para mejorar el carácter ferroeléctrico de nanoestructuras poliméricas.

Para poli(tereftalato de trimetileno) y sus nanocompuestos con nanotubos de carbono de pared única(SWCNT) se ha demostrado que mientras que la capa residual de polímero presenta carácter isotrópico, al acercarse a la interfase polímero/membrana se forman laminillas “edge-on”. En la interfaz, coexisten laminillas edge-on y flat-on como consecuencia de la fuerte interacción entre el polímero y la superficie de la membrana. Dentro de los nanoporos, el confinamiento induce una selección cinética de cristales de polímero que sólo permite el crecimiento de las laminillas cristalinas con su eje **a** paralelo al de los poros. Este efecto prevalece para los nanocompuestos.

También mediante plantillas nanoporosas de alúmina se ha desarrollado un método para conseguir cristalizar de manera completamente orientada polióxido de etileno (PEO), forzando la cristalización en el extremo de los nanocilindros. Así, en nanocilindros de PEO de diámetro suficientemente pequeño, la cristalización se inhibe. Sin embargo, una laminilla con características de monocristal puede generarse mediante nucleación sobre aluminio en el extremo del cilindro.

Para polímeros con interés en células fotovoltaicas se ha conseguido la preparación de nanocilindros de diámetros en el rango entre los 20 y los 200 nm. Se ha desarrollado un método de fabricación controlable de arreglos ordenados de poly (3 hexyl tiofeno) (P3HT) bien de nanohilos sólidos o bien de nanotubos, mediante la selección de las temperaturas de infiltración. El rango de temperatura elegido está relacionado con la estructura interna del fundido polimérico y es este hecho el que selecciona el tipo de estructura generada.

Nanoesferas poliméricas

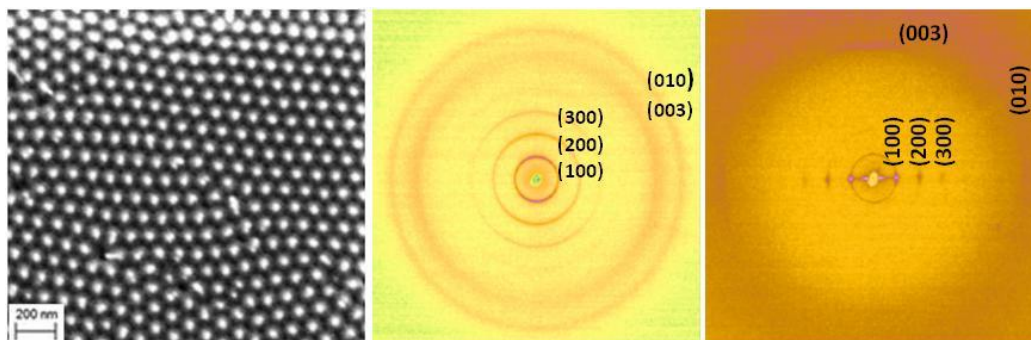
Se han preparado nanoesferas de poli(etil metacrilato) de diferentes tamaños mediante métodos de miniemulsión. Se ha estudiado la dependencia con el tamaño de su temperatura de transición vítrea, observándose un aumento de la misma cuanto menor es el diámetro de las esferas. Los resultados se han explicado mediante un modelo que implica que las nanoesferas contienen un número limitado de monómeros, lo que hace que exista una reducción del número de estados configuracionales respecto del material sin confinar.

ORDEN Y ORIENTACIÓN MOLECULAR EN PELÍCULAS DELGADAS Y NANOPILARES DE POLÍMEROS CONDUCTORES

Hemos investigado películas delgadas y nanopilares de poly(2,5-bis(3-hexadecylthiophen-2-yl)thieno[3,2-b]thiophene) también conocido como PBTTT y sus mezclas con [6,6]-Phenyl-C71-butyric acid methyl ester (C70 PCBM).

Las películas delgadas con distintos espesores se prepararon mediante spin-coating, su morfología se investigó mediante AFM y su estructura interna mediante dispersión de rayos X a ángulo alto con incidencia rasante (GIWAXS). De los resultados obtenidos mediante AFM podemos concluir que las películas de PBTTT presentan terrazas con alturas de ~2.2 nm. Además los diagramas de GIWAXS presentan una serie de máximos de intensidad ($h00$) de donde se puede determinar un espaciado d_{100} que está de acuerdo con la altura de las terrazas medida por AFM, indicando que las películas están formadas por láminas uniformes paralelas al sustrato. El orden mejora para la muestra más fina (40 nm) y sin embargo dicho orden se distorsiona para la mezcla PBTTT/ PCBM.

Nanopilares de los mismos sistemas se prepararon mediante la infiltración de la disolución en membranas ordenadas de alúmina (AAO). La estructura interna de los nanopilares se ha investigado mediante microdifracción de rayos X usando radiación de sincrotrón. El diagrama de difracción de los nanopilares de PBTTT demuestra una gran orientación del material comparado con el diagrama correspondiente al film residual de PBTTT. De esta información se concluye que dentro de los poros de alúmina los nanopilares de PBTTT consisten en láminas concéntricas con respecto a la pared del poro. Indicando que los enlaces π - π se apilan también concéntricos a los nanopilares.



(Izquierda) Imagen de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) de los nanopilares de PBTTT fabricados con una membrana de 40 nm de poro. Diagramas de difracción 2D: (centro) del material fuera de la membrana, (derecha) del material confinado dentro de los poros. Los poros están en dirección vertical.

MICROSCOPIA DE FUERZA ATÓMICA (AFM)

Durante el año 2013 se ha implementado la instalación AFM con un sistema que permite la realización de medidas eléctricas (Kelvin Probe) simultáneas a la visualización de estructuras nanoscópicas. Esta opción complementa la de

evaluación de las propiedades mecánicas (Módulo elástico, fuerzas de adhesión, deformación y nanoindentación) y la de medición del efecto piezoeléctrico (PFM). Las nuevas prestaciones permiten la medida de la corriente eléctrica a través de la punta del AFM con resolución nanométrica. La técnica se ha probado con éxito en películas delgadas de polímeros conductores.

CONTROL DEL PLASMÓN SUPERFICIAL EN PARTÍCULAS ANISÓTROPAS DE ORO

En colaboración con el grupo del Prof. A.R. González Elipe (Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC), se ha demostrado un método para controlar los modos del plasmón superficial del Au. Dicho método consiste en crecer partículas anisótropas de Au en películas delgadas transparentes de SiO₂ depositadas en fase vapor a ángulo rasante (GLAD). En este tipo de material compuesto, la anisotropía de las nanopartículas de Au, probada mediante la técnica de dispersión de rayos X a ángulo bajo con incidencia rasante (GISAXS), viene determinada por la inclinación de la estructura nanocolumnar de las películas de SiO₂ y produce un fuerte dicroísmo de la muestra evidenciado por el cambio desde un intenso color a un aspecto casi transparente dependiendo de la polarización de la luz y/o de la orientación de la muestra. La formación en estas muestras de patrones mediante un láser de nanosegundos demuestra el potencial de este procedimiento en el campo de la encriptación y antifalsificación.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

SIMULACIÓN MULTIESCALA DE FENÓMENOS FÍSICOS EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Estudios teóricos sobre catalizadores de polimerización

Se ha elaborado una profunda revisión, actualmente en proceso de evaluación en la revista *Organometallics*, sobre la aplicación de la metodología quimiométrica 3D-QSAR al análisis de la relación entre la estructura de los catalizadores de centro activo único y su actividad en la polimerización de olefinas. Nuestro grupo ha sido pionero en este tipo de aplicaciones tendientes a desarrollar nuevos sistemas catalizadores más efectivos de un modo predictivo.

Efecto de las ramificaciones sobre el proceso de cristalización de alcanos ultralargos en el estado fundido

Los alcanos ultralargos lineales y ramificados con una longitud de 150 a 390 átomos de carbono son materiales modelos para el estudio del mecanismo de plegamiento y del proceso de cristalización en polímeros. Se han construido modelos compuestos de 500 cadenas lineales y simétricamente ramificadas con una ramificación corta (SCB) metilo y butilo respectivamente. La elección de estos sistemas se ha sustentado en la existencia de resultados experimentales en la literatura que sirven como una guía de validación de los modelos. Se han seguido los estados iniciales del proceso de cristalización homogénea desde el estado líquido al estado ordenado, obteniéndose la evolución de los factores de estructura y de la cristalinidad. Los análisis muestran que el aumento del tamaño de la SCB causa un retardo de los procesos de nucleación siendo además los cristales producidos más pequeños. Esto es debido al impedimento que introducen las SCB para disponer en paralelo los segmentos de cadena que forman estructuras lamelares. Se han descrito y caracterizado distintos mecanismos de plegamiento de los estados iniciales del proceso de cristalización en función de la SCB.

Simulación de las propiedades físico-químicas de líquidos iónicos

Se han investigado las propiedades de dos líquidos iónicos (IL) homólogos [EMIM][B(CN)₄] y [HMIM][B(CN)₄] combinando técnicas experimentales y de simulación. Las simulaciones de dinámica molecular se realizaron con un campo de fuerzas (FF) en el que la parte electrostática del potencial se parametrizó en base al procedimiento EA-RESP usando cálculos cuánticos. La validez de este FF se comprobó por comparación con datos experimentales obtenidos en este mismo trabajo. Las densidades, tensiones interfaciales y propiedades dinámicas (coeficientes de auto difusión y viscosidades) de los ILs calculadas en la simulación presentan una desviación del $\pm 0.3\%$, $< 8\%$ y $\pm 30\%$, respectivamente respecto de las obtenidas experimentalmente. La influencia de la cadena alquílica en [HMIM][B(CN)₄] se observa en la menor densidad, menores coeficientes de auto-difusión y mayores viscosidades respecto a [HMIM][B(CN)₄], lo cual está en perfecta correlación con los datos experimentales.

Estudios computacionales del efecto de la ramificación de cadena corta sobre las propiedades dinámicas de poliolefinas

Es necesario conocer cuál es la estructura y dinámica del estado fundido como paso previo a los estudios de cristalización desde el estado fundido. La validación de los modelos en estado fundido se ha realizado por comparación con los resultados experimentales disponibles en nuestro grupo de investigación. Además, las simulaciones han permitido evaluar parámetros muy difíciles de obtener experimentalmente, como el peso molecular entre enmarañamientos (M_e) y el tiempo de relajación de enmarañamientos (τ_e). También se ha demostrado que la cantidad de SCB afecta a las dimensiones moleculares y a la dinámica molecular de cadenas enmarañadas. La construcción de modelos y su posterior simulación han ayudado a la interpretación de los resultados experimentales en reología y dinámica lineal obtenidos por nuestro grupo.

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Se ha llevado a cabo el estudio de las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas y de sus mezclas, tanto en el estado fundido como en el estado sólido, en el marco de colaboraciones con distintos grupos de investigación, tanto a nivel académico como industrial. El estudio de las propiedades de los modelos homogéneos ha permitido distinguir el efecto, muy discutido en la literatura, de la influencia de SCB en la viscosidad Newtoniana. La aplicación de modelos físicos alimentados por resultados de simulación por ordenador, manifiestan que la disminución de la viscosidad obedece más a cuestiones ligadas a la naturaleza conformacional de las cadenas que a factores locales. La presencia de SCB genera conformaciones macromoleculares más compactas dando lugar a una disminución de la densidad de enmarañamientos, y por tanto de la viscosidad. En cuanto al estudio de sistemas polidispersos, hay que destacar importantes efectos emergentes, como el aumento de los valores de viscosidad y elasticidad. La aplicación de modelos físicos, de nuevo junto con parámetros obtenidos mediante simulación, dan cuenta de estos efectos, asociándolos a la presencia de colas de peso molecular ultra-alto, (>1.000 kDa). Las propiedades reológicas de mezclas de poliolefinas han sido también objeto de estudio, ya que son especialmente interesantes en los procesos de separación de fases. Los estudios realizados a este respecto en colaboración con la empresa Dow Chemicals arrojan un efecto de la SCB en la estructura de fases de las mezclas en el fundido. La naturaleza de esta estructura de fases es de gran importancia durante las operaciones de procesado, puesto que afectan a las propiedades finales y a la aplicación de estas mezclas en la fabricación de películas delgadas o “films”. En cuanto a las propiedades en el estado sólido, se ha realizado un estudio combinado sobre la microestructura y las propiedades mecánicas en los modelos ramificados de poliolefinas. El análisis de los resultados indica que la variación del módulo elástico se puede discutir en términos de la existencia de una fase amorfa rígida, además de la cristalina y la fase amorfa móvil. La aplicación de modelos de acoplamiento que tienen en cuenta las tres fases explica las propiedades de los materiales, al menos de manera cualitativa y de acuerdo con evidencias experimentales obtenidas mediante espectroscopía Raman y aniquilación de positrones. Por otro lado, estudios preliminares sobre el proceso de cristalización de sistemas modelo ramificados en disolución diluida mediante calorimetría diferencial de barrido, microscopía electrónica de transmisión y rayos X, ponen de manifiesto el profundo efecto de la SCB en el hábito cristalino y en el espesor del cristal laminar. Los resultados están en consonancia con resultados previos obtenidos mediante simulación por ordenador.

SIMULACION DE SISTEMAS MACROMOLECULARES BIOLÓGICOS

Receptores de factor de crecimiento epitelial (EGFR)

Los receptores EGFR pertenecen al grupo de proteínas de membrana involucrado en procesos de señalización de proliferación celular, principalmente. La complejidad estructural del sistema EGFR completo incluyendo la presencia de la membrana celular ha sido el principal motivo por el cual la estructura de dichos sistemas ha sido elucidada en cada uno de sus dominios por separado. Desde el punto de vista de simulación, sólo recientemente se han publicado modelos de EGFR que incluyen la bicapa lipídica gracias a la utilización de superordenadores de difícil acceso a los grupos de investigación académicos. En nuestro grupo hemos desarrollado un modelo basado en simulación de dinámica molecular de “grano grueso” que contempla la estructura del receptor ErbB2 embebido en la bicapa lipídica. El uso de estos modelos permite contemplar sistemas más complejos y llegar a tiempos de simulación mayores empleando consumos razonables de recursos de computación. Esto ha permitido incluir la interacción del ErbB2 con el anticuerpo monoclonal Trastuzumab, que es usado clínicamente en el tratamiento de cáncer de mama metastático y cuyo mecanismo no se conoce en profundidad. Los modelos obtenidos reproducen muy satisfactoriamente tanto los resultados de simulación a escala atómica como los estructurales experimentalmente elucidados. Como valor añadido, los modelos de grano grueso permiten proponer un mecanismo molecular para la acción del anticuerpo que concuerda con las observaciones experimentales.

Mecanismo de poración en la membrana bacteriana del péptido antimicrobiano Bacteriocina AS-48

Los péptidos antimicrobianos se están postulando como una alternativa eficaz a los fármacos antibióticos en el tratamiento de enfermedades infecciosas de origen bacteriano. La membrana bacteriana es el objetivo de dichos péptidos en contraste con las proteínas específicas asociadas al metabolismo bacteriano que son la diana usual de los antibióticos. Uno de dichos péptidos es la bacteriocina AS-48, pequeña proteína cíclica que muestra un amplio espectro antimicrobiano contra bacterias Gram-positivas y Gram-negativas. Los estudios estructurales realizados mediante RMN y Rayos X sugieren un mecanismo de actuación que supone una transición de una forma estable en disolución acuosa a otra estable en la membrana lipídica. Con objeto de interpretar los resultados experimentales hemos realizado una serie de simulaciones de dinámica molecular con un modelo de “grano grueso” que permite muestrear más eficazmente el sistema analizado. Los resultados predicen la formación de distintos tipos de poros, selectivamente en las membranas bacterianas que dan como resultado la destrucción de las mismas.

BIOFÍSICA: ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL E HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

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

MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN en BIOPHYM

La instalación de microscopía electrónica de transmisión del BIOPHYM ha sido utilizada a petición de diversos grupos del IQFR, ICTP e IEM del CSIC. Se han estudiado las características estructurales y morfológicas de nanopartículas y materiales poliméricos o materiales compuestos de ambos. Las muestras se estudiaron bien como partículas independientes o como secciones ultra-finas. Algunos de los sistemas estudiados son: 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; y micelas y vesículas poliméricas. En la mayoría de los casos se pretende 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.
- Atomic and Molecular Physics at ultra-low temperatures.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics and to the characterization of new materials.

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- 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.
- Atoms and molecules in the quantum-degenerate regime or in optical lattices.
- Quantum simulation and quantum metrology.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.
- Van der Waals interaction in ZIFs.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Renormalization group.
- Monte Carlo simulations of quantum field theories.
- Numerical resolution of the gap equation including the formation of bounded pairs (molecules).
- Quantum Optics techniques for the resolution of the optical Bloch equations.
- Coherent quantum control methods.
- Hierarchical mean fields.
- Exactly solvable quantum models.
- Highly correlated ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY:

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Nuclear decay properties in stellar scenarios

We have continued the study of the nuclear decay properties in nuclei of special interest in astrophysics. In this work we have focused on some fp-shell nuclei, which are the main constituents of the stellar core in the late stages of the stellar evolution. In particular, it is a well established feature that the electron capture (EC) process is a fundamental mechanism to understand the nucleosynthesis of heavy elements and the pre-supernova stellar structure eventually driving a gravitational collapse of the core (supernova type II) or a thermonuclear runaway (supernova type Ia) in binary systems. The EC process is determined by the spin-isospin Gamow-Teller (GT) nuclear response as well as by the phase space available corresponding to the capture of degenerate electrons in the stellar plasma. While for unstable nuclei this information is mainly extracted from beta decays, 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 cross section becomes proportional to the GT matrix element without the energy limitations that characterize beta decays.

In this work we have studied these decay properties within a deformed proton-neutron quasiparticle random-phase approximation (QRPA) built on top of a selfconsistent Hartree-Fock mean field obtained with Skyrme (SLy4) forces and pairing correlations. First, we study the energy distribution of the GT strength in QRPA and compare our results to both experimental information extracted from (n,p) charge exchange reactions or their associated high resolution (3He,t) and (d,2He) reactions, and to state-of-the art Shell Model calculations. Our description of the GT distributions shows a quality comparable to the Shell Model and agrees very reasonably with experiment. Once the ability of our theoretical formalism to account for the decay properties of fp-shell nuclei has been demonstrated, we study the EC rates as a function of densities and temperatures reached in the stellar scenarios. We find that EC rates at low densities and temperatures are very sensitive to the low-lying GT strength distributions. On the other hand, at higher densities and temperatures EC rates are more sensitive to the global behavior of the GT strength distribution.

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 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 .

MESOSCOPIC AND STRONGLY CORRELATED SYSTEMS

Quantum transport

We analyze the transmission phase through quantum dots in the Coulomb blockade regime. In Aharonov-Bohm interferometric experiments a transition in the behavior of the transmission phase between a mesoscopic regime where phase slips appear randomly in between resonances and a universal regime where there are phase slips in between every couple of consecutive resonances. This transition appears as a function of the number of electrons in the quantum dot. We have calculated the conductance and the transmission phase using the embedding method in combination with Density Matrix Renormalization Group algorithm. We studied different models for the quantum dot with varying values of the interaction strength and coupling to the contacts. The electronic interaction increases systematically the phase slips. However, we believe that the actual reason for this increase is a kind of collectivization of the resonances with different consequences as that observed in the experiments. The results suggest that quantum chaotic correlations between consecutive wave functions are the most probable cause of the appearance of the universal regime in the transmission phase.

We study the decay of wavepackets inside chaotic and regular lattice billiards (see Fig. 1). Even if the spectral properties of the billiards are very different between the regular and the chaotic case, their decay properties are similar. In both cases they are dominated by states in the middle of the band. Once the billiard is opened, these states are separated into the ones that couple very well to the outside and those that do not decay ("scarred states"). The former ones are responsible for the exponential decay at short times while the latter ones are responsible for the long time behavior in which part of the wave packet never leaves the billiard. These states have interesting potential applications in quantum transport for different systems. We presented diverse applications in experiments with photonic waveguides, cold atoms, and superconducting circuits.

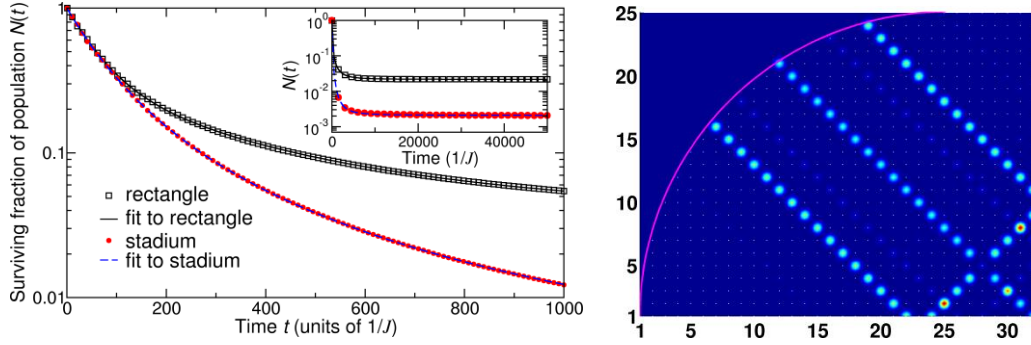


Fig. 1. (Left) Number of particles than remain trapped as a function of time for a billiard with rectangular shape (black squares) and a stadium (red dots). (Right) Example of a "scarred" state in the stadium.

Electronic and elastic properties of graphene

During 2013 we have investigated the elastic and electronic properties of graphene, paying attention to many-body effects that can significantly modify the low-energy dispersion of phonons as well as electron quasiparticles. In this respect, we have studied the influence of the electronic degrees of freedom in the renormalization of the acoustic branch of out-of-plane phonons (flexural phonons), and the consequent development of an instability in the phonon dispersion at long wavelengths. Furthermore, we have carried out an extensive numerical analysis of the interacting electron system to establish the dynamical generation of a gap in the spectrum, discerning between the conventional exciton condensation and the alternative development of a mass breaking parity and time-reversal invariance (so-called Haldane mass).

In the problem of the phonon renormalization, we have completed a previous analysis of the role played by the electron-phonon interaction, making this time a full self-consistent formulation of the many-body problem for the flexural phonons. Thus, the Schwinger-Dyson equations for that system have been solved adopting the so-called self-consistent screening approximation. In this scheme, the interaction propagator is dressed by electron-hole as well as phonon excitations, while the interaction is applied in turn to recompute the renormalization of the phonon dispersion by self-energy corrections. We have shown that an iterative resolution of the equations is in general possible, working with a discretization of momentum as well as frequency variables that has the feasibility of incorporating finite-temperature effects. The results obtained for the renormalization of the flexural phonons have unveiled the existence of three different regimes, depending on the strength of the electron-phonon interaction. The phonon dispersion undergoes in general a downward renormalization from the coupling to the electronic degrees of freedom but, for not too large interaction strength, the phonon system can be still characterized by a set of regular parameters. Above certain value of the electron-phonon coupling, however, the self-consistent equations can be only solved in terms of a phonon self-energy that becomes complex, pointing at the instability of the flexural phonon modes. Finally, for a higher value of the coupling, we have seen that the system reaches a critical point beyond which the bending rigidity gets formally negative values, reflecting an even stronger instability of the many-body theory. By computing the relevant response functions for the phonon system, we have been able to characterize on physical grounds the last two phases. Thus, we have seen that the regime with complex self-energy corresponds to the decay of phonons into excitations with hybrid electron-phonon character, that result from the strong coupling between the two types of degrees of freedom. Moreover, we have also shown that the critical point with vanishing bending rigidity corresponds to the divergence of the correlations of the curvature field in the metallic membrane. This has been interpreted in turn as the signature of the condensation of that operator, opening the way to explain the phenomenology of the ripples formed spontaneously in free-standing graphene samples.

Regarding the study of many-body effects in the electronic sector, we have undertaken the numerical investigation of the system of Dirac quasiparticles characteristic of graphene, interacting with the scalar part of the electromagnetic potential. In this task, we have applied a lattice gauge theory approach to the problem, taking a cubic grid to represent the space-time variables and adopting a formulation of staggered fermions as a most efficient way to carry out the numerical simulations of the system. This choice has proven to be particularly convenient to preserve the chiral symmetry as well as the parity and time-reversal invariance of the original theory, establishing an ideal starting point to investigate the dynamical breakdown of these symmetries from the effect of the Coulomb interaction. For that purpose, we have performed extensive Monte Carlo simulations in the lattice formulation, aimed mainly to determine the susceptibilities for the order parameters signaling the opening of a gap in the spectrum. The numerical results have shown in particular the different character of the dynamical breakdown of chiral symmetry compared to that of parity. Thus, the susceptibility characterizing the former has shown to be positive, while that for the latter has displayed the opposite sign typical of a diamagnetic response. In either case, the behavior as a function of coupling constant has been found to correspond to a Kosterlitz-Thouless transition, i.e.,

showing an inflection point instead of a peak in the susceptibility. A large number of Monte Carlo sweeps (up to half a million) for a number of different independent runs (up to 36 for the larger lattices) have been made in order to achieve a precise determination of the position of the inflection points. Moreover, simulations have been carried out for different lattice sizes, ranging from 6^3 to 10^3 , in order to make a finite-size analysis of the susceptibilities. This has allowed to reach a relatively precise estimate of the critical point corresponding to chiral symmetry breaking, relying on numerical results that follow reasonably well the hypothesis of finite-size scaling. The simulation of the susceptibility signaling the breakdown of parity has been affected by much larger fluctuations in the critical regime, demanding then a much larger statistics for the precise determination of the critical point. The results available at present allow anyhow to confirm that the critical coupling for that latter pattern of symmetry breaking should be the lowest, marking therefore the dominance of the phase with condensation of the Haldane mass over the phase with conventional exciton condensation. The actual estimates of the critical couplings are found to be in any case below the maximum value of the nominal coupling of the interaction in free-standing samples of graphene, leaving still open the possibility of observing the gapped phase under suitable conditions where such a maximum coupling can be approached.

ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS AT ULTRA-LOW TEMPERATURES

Atoms and molecules in the quantum degenerate regime or in optical lattices

Quantum transport

We analyzed the formation of ultra-cold molecules using magnetically-tunable Feshbach resonances in a fermionic system. We developed a mean-field formalism incorporating pairing interactions and Cooper pairs as the precursors of molecules on the BCS side of the resonance, and applied it to the case of p-wave molecule formation. We showed the relevance of various experimental parameters (density, temperature, initial magnetic field and magnetic-field sweep rate) to determine the number of molecules formed.

Quantum simulation and quantum metrology

We proposed a scheme to implement a quantum simulator of the Dirac equation in 2+1 dimensions using fermionic atoms trapped in an optical lattice. This procedure is more flexible than previous proposals, and moreover it allows us to analyze the link between lattice deformations and the appearance of effective gauge fields. In the field of quantum metrology, we proposed an interferometric method ("multi-pulse quantum interferometry") to measure small phase variations in a train of laser pulses relying on one or more trapped ions as quantum probes. As a relevant example, we applied the protocol to measure the carrier-envelope phase variation in a frequency comb. We also studied a model system composed of a trapped ion and a polar molecule, and analyzed the prospects of using the ion as a probe of the electric dipole moment of the molecule.

Hierarchical mean field theory

We have extended the Hierarchical Mean Field Theory (HMFT), initially proposed for quantum magnetism, to the study of bosonic systems in optical lattices. We introduce a canonical mapping between the original bosons a set of composite bosons comprising cluster configurations of the lattice. This mapping preserves the matrix elements of the physical operators if a class of hard-core boson constraint is imposed.

In a first application of the method we treat a Bose-Hubbard model in a square lattice mapping it to composite boson of 2×2 plaquettes. We study the the resulting composite boson Hamiltonian within a generalized Hartree-Bogoliubov approximation giving rise to the mean field theory of composite bosons (CBMFT). In this approximation the phase diagram reproduces accurately the quantum Monte Carlo results for the transition between a Mott insulator and a superfluid. The present formalism could also describe the low energy collective modes. In particular, we study the degenerate particle and hole excitations along symmetric a line of density 1 in the Mott phase going to zero energy at the critical point of the transition to the superfluid. From this point on, one of the modes gives rise to the Goldstone mode at zero energy and the other one to the Higgs boson with increasing energy as we go deeply into the superfluid. The behavior of the Higgs boson has been recently measured in a two dimensional lattice (Nature 487, 455 (2012)). Our theoretical description of these modes fits nicely the experimental points as it can be seen in Fig. 2. (Phys. Rev. Lett. 111 (2013) 045701).

The CBMFT can be easily extended to more general lattice boson with long range interactions or synthetic gauge fields where other "state of the art" many body treatments face significant hurdles.

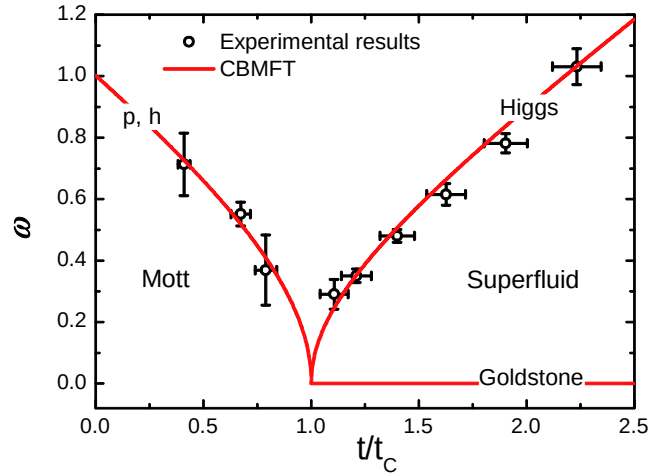


Figure 2: Degenerate particle (p) y hole (h) modes along the symmetric p-h in the Mott phase, and the Higgs and Goldstone modes in the superfluid phase. Experimental results from Nature **487**, 455 (2012).

GRAVITATION AND COSMOLOGY

During 2013 we have continued our study of inhomogeneous cosmologies within the framework of Loop Quantum Cosmology, paying special attention to the treatment of cosmological perturbations around homogenous and isotropic universes like the one in which we live, at a first approximation. More specifically, we have presented a complete quantization of an approximately homogeneous and isotropic universe with small scalar perturbations in the case in which the matter content is a minimally coupled scalar field and the spatial sections are flat and compact. The quantization has been carried out along the lines that were put forward by our group in previous works for spherical topology. We have truncated the action of the system at second order in perturbations, and fixed the local gauge freedom at the classical level, although we have discussed different gauges and shown that they lead to equivalent conclusions. Moreover, we have considered also descriptions in terms of gauge-invariant quantities. The reduced system obtained in this way has been proven to admit a symplectic structure, and its dynamical evolution is dictated by a Hamiltonian constraint. Then, we have proceeded to quantize the background geometry with loop techniques, while a Fock representation has been adopted for the inhomogeneities. The latter has been selected by uniqueness criteria proposed by our group in the context of quantum field theory in curved spacetimes. These criteria determine also a specific scaling of the perturbations. In our hybrid quantization, combining loop and Fock methods, we have promoted the Hamiltonian constraint to an operator on the kinematical Hilbert space. Then, if the zero mode of the scalar field is interpreted as a relational time, a suitable ansatz for the dependence of the physical states on the loop degrees of freedom leads to a quantum wave equation for the evolution of the perturbations. Alternatively, the solutions to the quantum constraint can be characterized by their initial data on a minimum-volume section. The physical implications of this model are being addressed at present, in order to check whether they are compatible with cosmological observations.

An important point in our hybrid quantization is the possibility of selecting a unique Fock representation for the perturbation fields by adhering to certain criteria that our group introduced in recent years. These criteria consist in the requirements of (i) invariance of the vacuum under the spatial symmetries of the field equations and (ii) unitary implementability of the dynamics in the quantum theory. In the case of cosmological perturbations, the fields that describe the inhomogeneities go through an inflationary period that can be understood as the propagation in a de Sitter background. With this motivation, we have proven that, under the standard conformal scaling used in cosmology, a massless field in de Sitter spacetime admits an $O(4)$ -invariant Fock quantization such that time evolution is indeed unitarily implemented, and that this quantization is essentially unique. This result disproves previous claims in the literature. We have also discussed the relationship between this privileged quantization with unitary dynamics and the family of $O(4)$ -invariant Hadamard states given by Allen and Folacci, as well as with the Bunch-Davies vacuum, standard in inflationary cosmology.

Moreover, we have demonstrated the robustness of our criteria for the selection of a unique Fock quantization of scalar fields of Klein-Gordon type in nonstationary scenarios with compact spatial sections by allowing also for different field descriptions that are related by means of certain nonlocal linear canonical transformations that depend on time. More specifically, we have considered transformations that do not mix eigenmodes of the Laplace-Beltrami

operator, which are supposed to be dynamically decoupled. Canonical transformations of this kind are found in the study of scalar perturbations in inflationary cosmologies, relating for instance the physical degrees of freedom of these perturbations after gauge fixing with gauge invariants. Hence, our results have direct implications for our hybrid quantization of scalar perturbations in Loop Quantum Cosmology. We have characterized all possible transformations of the considered type and shown that, independently of the initial field description, our criteria of spatial symmetry invariance and unitary dynamics lead indeed to a unique Fock quantization, modulo unitary transformations which do not affect the physical predictions.

Another issue that we have analyzed in detail in the context of Loop Quantum Cosmology is the resolution of singularities. Let us recall that one of the most remarkable phenomena in Loop Quantum Cosmology is that, at least for homogeneous cosmological models, the Big Bang is replaced with a Big Bounce that connects our universe with a previous branch without passing through a cosmological singularity. For the first time in the literature, we have studied the existence of singularities in Loop Quantum Cosmology including inhomogeneities and checked that the behavior obtained in the purely homogeneous setting continues to be valid. We have focused our attention on Gowdy cosmologies with linearly polarized gravitational waves and used effective dynamics to carry out the analysis. For the considered cosmological model, we have proven that all potential cosmological singularities are avoided, generalizing the results about resolution of singularities to this scenario with inhomogeneities. We have also demonstrated that, if a bounce in the (homogeneous background) volume occurs, the inhomogeneities increase the value of this volume at the bounce.

In addition, we have identified a signature of quantum gravitational effects that survives from the early universe to the current era: Fluctuations of quantum fields as seen by comoving observers are significantly influenced by the history of the early universe. The existence (or not) of a quantum bounce leaves a trace in the background quantum noise that is not damped and would be non-negligible even nowadays. We have estimated an upper bound to the typical energy and length scales where quantum effects are relevant. We have also presented the graviton self-coupling problem in detail and explicitly solved the infinite-iterations scheme associated with it, thus complementing previous results in the literature concerning the recovery of General Relativity within this setup. We have concluded that, as long as one requires the (deformed) preservation of gauge invariance, one naturally recovers the structure of General Relativity, but in a version explicitly showing an underlying Minkowski spacetime, in the spirit of Rosen's flat-background bimetric theory.

During this last year, on the other hand, we have developed also lines of investigation in quantum and anomalous geometry. Gianluca Calcagni has dedicated the whole 2013 in consolidating a class of models of multiscale spacetime where the geometry of the universe shows the typical properties of multifractals. The goals have been 1) to develop a self-consistent theory which could explain analytically certain universal features of spacetime which appear in many independent models of quantum gravity, 2) to develop its phenomenology, especially in classical and quantum field theory and in cosmology, and 3) to test its experimental viability. Goals 1) and 2) have been fully met and we have greatly clarified the fundamental structure of these geometries, their properties in the presence of metric curvature and their cosmological consequences for the very early universe and the cosmological constant, while 3) is still in progress. In parallel, Calcagni has worked on the cosmology of braneworld and noncommutative scenarios as well as on anomalous geometries and the calculation of their spectral dimension in various approaches including string theory, asymptotic safety, black holes, loop quantum gravity, and a super-renormalizable theory of quantum gravity proposed by L. Modesto and others, where cosmological bouncing solutions were found.

Regarding the study of general aspects of quantum field theory, we have devoted special attention to the Hamiltonian formalism for theories defined in bounded spatial regions. The main importance of these models in the context of quantum gravity lies in the fact that the usual treatment of the black holes in loop quantum gravity is carried out by introducing isolated horizons, a type of internal space-time boundary where natural boundary conditions --that give rise to a quasi-local horizon-- are imposed. The main problem encountered when dealing with these systems is the interpretation of these boundary conditions, in particular finding out whether they are constraints in the usual sense and their type (first or second class). This is crucial in order to determine how they must be dealt with when quantizing.

From a technical point of view the presence of boundaries forces us to use mathematical schemes more elaborate than the ones that are formally obtained by generalizing the traditional Dirac method employed in the study of singular Lagrangian systems. The appropriate framework to study such systems in the presence of boundaries is provided by the geometric methods developed for this purpose by Gotay, Nester and Hinds. These authors developed a precise geometric scheme (which, in the particular case of field theories, is based on the use of differential manifolds modeled upon infinite dimensional Banach spaces) that is perfectly suited to the kind of problem that interests us. Notice that, from a technical point of view, working with infinite dimensional manifolds requires the use of functional analytic methods that introduce significant mathematical difficulties in the formalism.

During the year 2013 we have started an ambitious program to work on this issue that has resulted in the complete and systematic study of scalar field theories subject to different sets of boundary conditions (Dirichlet and Robin type) and Maxwell fields (with perfect conductor and Neumann boundary conditions). Our work has given rise to a publication in *Classical and Quantum Gravity* (in collaboration with Jorge Prieto and Eduardo Sánchez Villaseñor) that has appeared in January 2014. At the present moment we are extending our results to interacting theories (scalar fields and Yang -Mills) and other models that are expected to have physical degrees of freedom associated with boundaries (Maxwell - Chern -Simons on $2+1$ dimensions).

Within the context of Loop Quantum Gravity and Loop Quantum Cosmology it is important to understand the physical consequences of the introduction of non-separable Hilbert spaces. Several models have been considered in the literature in this respect. Among them one of the most popular ones is the polymeric harmonic oscillator, for which the Hamiltonian has been studied by several authors. During last year we have studied the spectrum of this type of Hamiltonians in a precise mathematical sense. The most important result that we have obtained was to determine that the generic polymeric spectrum Hamiltonian consists of bands (as in solids). However, at variance with these, the spectrum is a pure point one (and therefore consists of actual eigenvalues). Our results have led to a publication in *Classical and Quantum Gravity* (in collaboration with Jorge Prieto and Eduardo Sánchez Villaseñor). At the present moment we are exploring the implications of these results, in particular in the context of Loop Quantum Cosmology. We are currently proposing alternatives to the use of non-separable Hilbert spaces.

Finally, we have devoted considerable effort to the study of combinatorial problems using the generating function methods that we have developed to study black hole entropy in loop quantum gravity. Our work has focused on the comprehensive study of an important class of generalized linear recurrences defining important families of combinatorial numbers (which include Euler, Stirling, Ward, Lah numbers among many others). We have written two works on this subject (in partnership with Jesus Salas and Eduardo Sanchez Villaseñor of the Carlos III University of Madrid).

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

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

During the year 2013, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within three sub-lines of research: molecular spectroscopy of non-rigid prebiotic molecules, structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species and determination of properties in non-reactive inelastic collisions at very low temperatures. Always we use as a basic tool, high-level ab initio methods to determine molecular structures and potential energy surfaces. Based on these tools and using our codes ENEDIM and FIT-ESPEC, rovibrational spectroscopic properties are predicted. With close-coupling molecular dynamics calculations collisional properties are determined from Van-der-Walls surfaces. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres.

Since 2004, we have made very detailed and comprehensive studies aimed to the characterization of carbon chains of astrophysical importance gradually increasing the complexity of the systems. These chains are considered relevant isolated species and intermediates of formation processes of large molecules such as PAHs and Fullerenes. Very accurate methods have been used to characterize small chains. Initially we studied pure chains type C_n with a reduced number of atoms (4, 5) which have no permanent dipole moment and are likely to be detected with infrared techniques. In the far infrared region, they can be seen through their bending modes. During 2013, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C₇ in collaboration with researchers from the University of King Saud of Ryad. We have also studied the processes of formation of anions type C_nX_m⁻ (X = N, H) recently detected in circumstellar regions. These species of low stability have permanent dipole moment and therefore are observable through radio astronomy. Taking into account the evolution of the electronic states of low energy throughout the processes of formation and destruction, we have proposed a general rule that predicts the detectability of anions in astrophysical sources. For all the studied carbon chains, we have characterized structures and potential surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonic effects. We predicted possible channels of isomerization, conical intersections and vibronic effects.

- Beta decay studies of dripline nuclei.
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Nuclear Instrumentation.
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot).
- Data Analysis tools.
- Nuclear Physics experiments for FAIR.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Surface-enhanced (SEVS) on metal nanostructures.
- Vibrational Spectroscopy applied to Cultural Heritage.
- SEVS applied to pollutant detection.
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction.
- Plasmonics in metal nanostructures.
- 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.
- Detection of infrared and Raman spectroscopic markers for diagnosis of neurodegenerative and neoplastic diseases.
- Molecular structure of proteins and lipids in functional food.

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 (Normal, FTIR, micro IR and SEIR).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of two dimensional correlations by H/D isotopic exchange.
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Theoretical Physics (Classical Electrodynamics) and numerical calculations.
- Theoretical Physics: Classical Electrodynamics.
- Infrared Spectroscopy (FTIR).
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Raman Spectroscopy (FT, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging).
- Optical Emission Spectroscopy (OES).
- Laser Induced Fluorescence (LIF).
- Laser Physical Deposition (LPD).
- Multivariate statistical analysis.

RESEARCH ACTIVITY:

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

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

(Project FPA2009-07387, (JAE-predoc. M. Carmona-Gallardo))

One of our goals is to measure the cross section of the ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ nuclear reaction. The astrophysical relevance of this reaction is two-fold. On one hand it plays a determining role in the prediction of the solar neutrino flux. Among all nuclear inputs parameters of the Standard Solar Model, the cross section of this reaction is the major source of uncertainty. On the other hand this reaction is important in the Big-Bang nucleosynthesis. Specifically, it is determining to resolve the abundance of the primordial ${}^7\text{Li}$ in the universe.

We have studied the cross section of this reaction at medium energies using two different experimental techniques. The first experiment was performed at the Centro de Microanálisis de Materiales (CMAM) in Madrid with the *Activation Technique*, where the ${}^7\text{Be}$ recoils were deposited in copper catchers. The reaction cross section is estimated subsequently by detecting the delayed α from the ions in the catcher (M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)). The results resolve the discrepancies between the previous measurements and corroborate the first ab-initio calculations by T. Neff (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

In the second experiment we, in collaboration with Univ. of York and TRIUMF, used the ${}^7\text{Be}$ *Direct Detection Technique*. In this case, the cross section is obtained from the direct counting of the ${}^7\text{Be}$ recoils. The experiment was carried out using the DRAGON spectrometer at TRIUMF. DRAGON is a mass separator with magnetic and electric dipoles that allows separating the recoils of interest (${}^7\text{Be}$) from the unreacted beam (${}^4\text{He}$) before being detected in a Double Sided Si-strip Detector (DSSD) placed at the focal plane of the separator.

Additionally, some measurements were required to be performed in order to extract the overall cross section. Firstly, due to the separator is set to detect just one charge state of ${}^7\text{Be}$ recoil, the charge state distribution of Be ions through the ${}^3\text{He}$ gas target had to be studied. Secondly, the gas target density profile had to be determined experimentally by using the ${}^3\text{He}({}^{12}\text{C},p\gamma){}^{14}\text{N}$ resonance reaction. Finally, the recoil angular distribution is higher than the geometrical acceptance of the separator. Therefore, the transmission of the recoils throughout DRAGON was studied by reproducing the experimental conditions with the GEANT3-DRAGON simulation code. These experimental measurements together with the simulations have allowed us to determine the cross section of this reaction at four medium energies.

This study of the cross section for the nuclear reaction of ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ is the thesis topic of Mariano Carmona Gallardo, to be defended during the spring of 2014.

EXPERIMENT S393 R3B@GSI

(Project FPA2009-07387 (FPI2010-Predoc G. Ribeiro))

Within the international collaboration R3B, we have been studying nucleon transfer reactions using radioactive beams accelerated to energies of 490 A MeV and let to impinge on a proton target (CH_2), producing a cocktail of exotic light nuclei. The PhD thesis of G.Ribeiro is focused in the analysis of this experiment, in particular on the case of nuclei beyond the neutron drip-line. During 2013 he has been exploring the unbound nuclei ${}^{13}\text{Be}$, which is produced in the reaction of a carefully selected incoming beam of ${}^{14}\text{B}$ on the proton target. In this kind of nuclear structure physics experiments the technique of complete kinematic is being used, which means that all the energy, time and position parameters are determined for the incoming beam as well as for the scattered fragments after the target, in order to fully detect the energy and momentum conservation in the reaction. To guarantee the detection of nuclei beyond the neutron drip-line, resonances like the ${}^{13}\text{Be}$, this technique is absolutely needed, as the half-lives involved are so short that direct detection is not possible, and we have to reconstruct these components from the signals left by their decay products and use the energy and momentum conservation.

The study of this kind of nuclei gives information about the exotic phenomena that appears at the borders of the nuclei chart, like the unbound states, halos and new magic numbers. The results of this analysis will allow us to check some of these states that have been suggested in recent publications.

STUDY OF THE DIPOLE POLARIZABILITY OF LIGHT NUCLEI

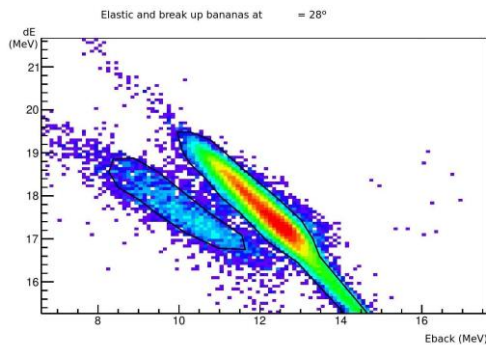
One of the most important and unexpected discoveries in recent Nuclear Physics has been the existence of a neutron halo in some nuclei close to the border of stability (the n drip-line). The halo-state is a consequence of a threshold-

phenomena resulting from the closeness of bound states to the continuum. The combination of a small binding energy along with the short-range nuclear forces allows the nucleon (or cluster/group of nucleons) extend and have a non-negligible probability to distances far greater than the normal nuclear RADIUS increasing its polarizability. The parameter of polarizability is a fundamental property of the nucleus and is a measure of its response to an external electric field. In the adiabatic limit (which corresponds to high excitation energies), the elastic scattering cross section deviates from the prediction of the Rutherford formula proportional to the intensity of the dipole polarizability. Therefore, when measuring the effective cross section for elastic scattering of a core against a heavy target at energies close to the barrera coulombiana, one can determine the polarizability of the nucleus. We have this year completed the analysis of the E1104 experiment on ^{11}Li (see the report of 2012) and taken new data for the one neutron halo nucleus ^{11}Be with the experiment S1202, which progress is explained in the continuation.

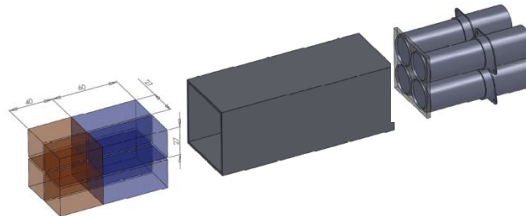
EXPERIMENT S1202: EXPLORING HALO EFFECTS IN THE SCATTERING OF ^{11}Be ON HEAVY TARGETS

(Project FPA2012-32443 (Predoc on contract, Vicente Pesudo))

In this experiment we study the reaction of the 1n-halo nucleus ^{11}Be on lead and gold targets. A halo nucleus is characterized by, instead of having a homogeneous density as most nuclei, 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. In the case of ^{11}Be the 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, this one-neutron halo is a unique scenario, that allows us to study how the core interacts with a single neutron and given that it is the only halo nucleus with a bound excited state, it is interesting the study of the inelastic scattering in addition to the break-up and elastic scattering. After the experiment on lead target (^{208}Pb) in 2012, in the summer of 2013 we performed the experiment on gold (^{197}Au) and the most relevant angular range has been analyzed.



The figure illustrates the energy depositions in the two series detectors (dE vs E) that allow us to differentiate break up from elastic scattering.



INSTRUMENTATION FOR FAIR: ADVANCES IN THE DETECTION OF HIGH ENERGY PROTONS IN R3B

(Projects ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333 and FPA2009-07387 (Dr. E. Nácher, Prof. O. Tengblad, A. Perea, Dr. Jose Sánchez del Río))

In the group we work on the design, simulation and construction of a calorimeter for gamma radiation and protons that will be installed in the R3B experiment at FAIR. The front of this calorimeter will receive radiation and charged particles of very high energy since the reaction products in nuclear reactions at relativistic energies mainly are emitted in the forward direction. This front, Forward Endcap, is the responsibility of our group. During 2013 we have a prototype already close to the design of the final detector. We call it CEPA4 and consists of 4 individual scintillation detectors, each consisting of two crystals: LaBr₃ and LaCl₃ coupled optically. A sketch of the detector is shown in Figure 1. In March the response of CEPA4 to high energy protons (70 - 230 MeV in steps of 10 MeV). The experiment was performed at a cyclotron recently installed in Krakow for medical applications. In Figure 2 we can see, for the first time, a spectrum corresponding to 220 MeV incident protons completely stopped in the detector. The peak on the right is protons separate from the background. These data are now being fully analysed and will soon be published.

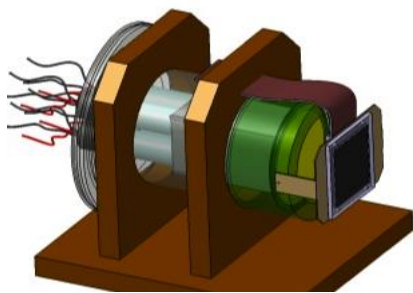


Figure 1. Above: sketch of the four CEPA4 crystals and their photomultipliers. Bottom: sketch of the experimental set-up with a Silicon detector placed in front of the CEP4.

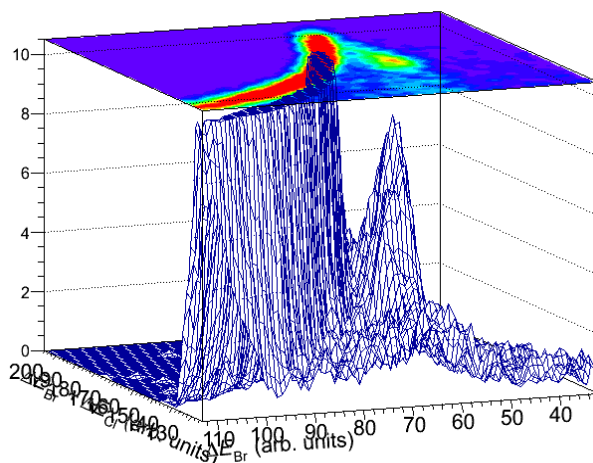


Figure 2 Graphical 3D representation of the 220 MeV protons absorbed in CEP4. Energy deposited in the deposited in the LaCl3 vs LaBr3 is represented in the horizontal plane. The Z axis is the number of protons detected.

TRAINING OF A TECHNICIAN IN THE AREA OF EUROPEAN FACILITIES

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

Ruben 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 mechanisms are used for changing the Kicker position.

EXPERIMENT NP1012-RIBF49R1: IN-BEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF NEUTRON-RICH Ni ISOTOPES WITH THE DALI2 SPECTROMETER AT RIKEN (JAPAN)

(Project FPA2011-29854-C04-01)

The experiment NP1012-RIBF49R1 has been performed with the aim to study the neutron-rich nuclei $^{73,74,75}\text{Ni}$, only 3 - 5 neutrons away from the doubly-magic nucleus ^{78}Ni . In the Ni isotopic chain the filling of the $g_{9/2}$ neutron orbit was predicted to go along with a strong core polarization due to the spin-isospin interaction which enhances the electromagnetic transition rate, $B(E2)$, a measure of the quadrupole collectivity. In order to understand the underlying mechanisms and fix the seniority-scheme pattern of the $B(E2)$ values, we performed a Coulomb excitation measurement at intermediate energies using the DALI2 γ -ray spectrometer and a $^{73,74,75}\text{Ni}$ cocktail beam delivered by the BigRIPS spectrometer.

EXPERIMENTS NP1112-RIBF87, NP0702-RIBF26R1, NP1112-RIBF86 Y NP1112-RIBF80: DECAY SPECTROSCOPY WITHIN THE EURICA PROJECT AT RIKEN (JAPAN)

(Project FPA2011-29854-C04-01)

In 2012 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 and beta-decay) in regions of the nuclidic chart which have never been accessible to such type of studies before. In 2013 we participated in the second EURICA campaign dedicated to the study of neutron-rich isotopes in different regions of the chart of nuclides. New experimental information was obtained for a number of very neutron rich nuclei around the doubly-magic nuclei ^{78}Ni and ^{132}Sn . In addition regions far away from the doubly magic nuclei were studied, namely the neutron rich Zr, Mo and Nd isotopes.

DECAY SPECTROSCOPY OF DOUBLY-MAGIC ^{100}Sn AT RIKEN (JAPAN)

(Project FPA2011-29854-C04-01)

In June 2013 a dedicated experiment was performed at RIKEN to study in detail the decay properties of ^{100}Sn , the heaviest particle-bound doubly-magic nucleus with equal number of protons and neutrons ($N=Z$). This very neutron-deficient nucleus was produced in the fragmentation of a ^{124}Xe beam on a Be target and separated and identified by the high-resolution separator BigRIPS of the RIBF at RIKEN. In a previous experiment performed at GSI (Darmstadt, Germany) in 2008, the $\log(ft)$ value of the β -decay of ^{100}Sn to ^{100}In (the Gamov-Teller decay of a $g_{9/2}$ proton to a $g_{7/2}$ neutron) was measured and found to be the smallest known so far all over the chart of nuclides (C. Hinke et al., Nature 486 (2012) 341). In the present experiment, 2035 ions of ^{100}Sn were identified which exceeds the statistics of the previous experiment by nearly a factor of ten. We therefore hope to be able to determine more precise values of the β -decay half-life and endpoint energy from the new data set. In addition the long predicted 6^+ isomeric state in ^{100}Sn will be searched for. Furthermore detailed information on the decay properties of many other isotopes in the vicinity of ^{100}Sn will be obtained.

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 2013 we have started the numerical simulation of some of aspects of the carbon-based nanostructured materials by means of novel density functional techniques adapted to dispersive interactions. The necessity to such an extension to more physically accurate numerical approaches has become evident in our previous studies where some of the behaviours we have experimentally observed resulted irreproducible by means of purely “classical” effective methods.

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

In recent years much of the work in this area developed by the group has been related with the Spanish candidature to the European Spallation Neutron Source. Within this respect, on May 2009 an inflexion point was reached after an informal agreement in Brussels in favor of the Swedish site proposal (Lund) and the subsequent agreement between the Spanish Science and Innovation Ministry and the relevant Swedish. The ongoing activities were 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 of accelerators in radiation oncology. Three would be the main objectives of that 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 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 2013 two important technical desing reports were done, namely the corresponding to the target system and that of the radiofrequency quadrupole system with excellent reviews from the corresponding international advisory committees.

SPECTROSCOPY IN INFRARED LASER INDUCED ABLATION PLASMAS

We have studied the properties of the plasma-plume accompanying the pulsed laser ablation of lithiumfluoride (LiF) at medium vacuum conditions (4 Pa) were studied by a combination of spatially and temporally resolved optical emission spectroscopy. The laser-induced plasma at CO₂ laser intensities ranging from 0.18 to 4.7 GW × cm⁻² was found strongly ionized in F⁺, Li⁺, F₂⁺, and F₃⁺ species and rich in neutral lithium and fluorine atoms. The temporal behavior of excited Li atoms and ionized excited species F⁺, Li⁺, F₂⁺, and F₃⁺ is reported. The results show a faster decay of the continuum emission and Li⁺, F₃⁺, and F₂⁺ ionic species than in the case of F⁺ and neutral Li atoms. The velocity distributions of atomic and ionic species are obtained from time-of-flight measurements. Electron density and excitation temperature in the laser-induced plasma were estimated from the analysis of spectral data at various delay times from the CO₂ laser pulse incidence. From the intensity decay of Li⁺, F⁺, F₂⁺ and F₃⁺ with the delay time, we have estimated the three-body electron-ion recombination rate constants for these species.

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. A glassy material similar to fulgurites (fusion of the soil which has been struck by lightning) was prepared by continuous wave (CW) CO₂ laser ablation of lime-pozzolan mortar at medium-vacuum conditions and atmospheric pressure. In all the irradiated samples, the determined surface temperature is higher than the melting temperature of mortar (1556 K), so the surface is melted and converted into an amorphous glassy when cooled. The samples were studied combining laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) and Raman spectroscopy. The emission induced by the CW CO₂ laser is mainly due to electronic relaxation of Na, K, Si, Si⁺, Ca, O, N, and CaOH species along with an intense continuum due to blackbody emission. The emission induced on both natural and produced fulgurite is mostly due to electronic relaxation of Ca, Ca⁺, Si, Si⁺, Si₂⁺, Si₃⁺, H, Na, K, Mg, N, O, CaOH, and OH species with different relative intensities in some of them. Raman spectra show that the glassy formed material is similar to natural fulgurites, with the main difference arising from portlandite formed over the surface of the lime-pozzolan mortar. As the laser power increases, less density SiO₂ glass is formed with more Q₄ and Q₁ units present.

The spatio-temporal evolution of the silicon monoxide SiO plasma produced by a high-power CO₂ pulsed laser has been investigated using optical emission spectroscopy (OES) and imaging methods. The formed plasma was found to be strongly ionized and rich in neutral silicon, oxygen atoms and very weak molecular bands of SiO. Time integrated and time resolved two-dimensional (2D) OES plasma profiles were recorded as a function of emitted wavelength and distance from the target. Silicon emission lines have been employed for deducing the electron density during the plasma expansion. The relative intensities of two Si₂⁺ lines has been used to calculate the time evolution of the plasma temperature

These works have been done in collaboration with Profs. J. J. Camacho, J. P. Cid and J. M. Poyato (Physical-Chemistry Department of UAM) y M. Martín (IQFR).

INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

Infrared and Raman spectroscopies have been applied to identify biological substances corresponding to the spectroscopic markers previously detected in peripheral blood plasma for diagnosis of Alzheimer's disease. Some of the said markers can be described in terms of increase of the globulin/albumin ratio, particularly concentration increasing of α -globulins (α_1 -antitrypsin, α_1 -antiquimotrypsin, α_2 -macroglobulin), β -globulins, γ -globulin, transferrin and ubiquitin, and concentration increasing of A β -amyloid peptides. We have determined a suitable protocol for collecting and processing samples of peripheral blood in various hospitals for further infrared and Raman analysis in order to validate the method of diagnosing Alzheimer's disease.

STRUCTURE OF BIOLOGICAL SYSTEMS IN FOOD

In collaboration with the Institute of Science and Technology of Food and Nutrition (ICTAN, CSIC) we have applied infrared spectroscopy to elucidate the gel structures of various oil-in-water emulsions and their correlation with the corresponding rheological properties. These gelled flour chia emulsions have greater cohesiveness when stabilized with alginate or gelatin, due to penetration of the emulsion droplets within the network of the respective gel.

NANOFABRICATION

The nanofabrication work has continued with the manufacture of nanoparticles (NPs) with metallic plasmonic properties, displaying advanced spectroscopic and catalytical applications. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs

with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been made in a very special way to develop protocols for the preparation of silver nanostars, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in SERS, because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. The protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy. Moreover, the assembly of NPs was conducted by using bifunctional 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 was a fundamental work line in our group during 2013. 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.

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

Additionally, in other functionalization experiments of NPs aliphatic aromatic dithiols of different length were also employed. These bifunctional molecules perform a double function: a) the nanoparticle coupling with formation of interparticle junctions where a large intensification of the field occurs, and b) the creation of intermolecular cavities that allow the assembly of analytes. The detection of analytes is then possible because then they are concentrated in the interparticle cavities where a large intensification of the field is achieved. The NPs linking induced by dithiols was also investigated by plasmon resonance and TEM. Functionalized NPs were applied to the detection of organochlorine pesticides like endosulfan, aldrin dieldrin and lindane. Moreover, the sensitivity and selectivity of this detection was tested by analysis of the adsorption isotherms. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of 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). These molecules were also used in the characterization of Ag surfaces prepared by pulsed laser deposition by researchers of the Institute of Optics.

IMMOBILIZATION OF PLASMONIC NANOPARTICLES ON SUBSTRATES OF CATALYTIC INTEREST

During the past year we have conducted new experiments leading to the immobilization of NP on substrates employed in catalysis. These attempts were aimed at obtaining new materials doped with plasmonic NPs to improve their SERS performance, increase their manipulability and, at the same time, to have catalytical applications. For this purpose we have employed the following materials: mesoporous silica, active carbón, and oxides of Ti, Ce, Al and Zr. All these attempts were done 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 and selectivity to the analytical applications of these systems. Most of these investigations have been performed as a result of the collaboration between our group and researchers at the University of Paris XIII (France) in the frame of an i-LINK project. In fact, it was conducted a study of interaction of therapeutical peptides such somatostatine and octreotide with Ag and Au nanoparticles.

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, a previous characterization study was done on 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. To accomplish this task, different spectroscopic techniques were employed: Raman, SERS, fluorescence, circular dichroism. 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. 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 due to their large luminiscence. In this sense, we have carried out a structural and dynamical investigation upon polyphenolic substances extracted from the humic substances and from melanins produced by the digestion processes of fungi. Specifically, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin (soil, leonardite and lignite) on NPs of different morphology, and prepared by means of different protocols developing strategies to increase the intensification of the fluorescence and Raman on metal surfaces. In this regard, it was carried out the functionalization of the surfaces with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy).

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 and that exhibits strong antitumoral activity. This study was completed with the investigation of the behavior of this molecule at different pH carried out by means of fluorescence, UV-visible and SERS techniques.

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

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

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

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

The study of the optimal experimental conditions for obtaining dispersive Raman, FT-Raman and SERS spectra of the mauve dye synthesized at the Metropolitan Museum of Art of New York. Lasers at 633 and 785 nm were used for the dispersive Raman analysis. Powder and methanol solution samples were studied in the FT-Raman spectrometer. None Raman spectrum were obtained in the former cases. Intense spectra were only obtained by the SERS technique. The studied experimental conditions were the excitation wavelength, the pH and the nature of the aggregating agent. On the other hand, a separation process of the diverse components of the dye was done by thin layer chromatography (TLC) in order to identify them by obtaining the SERS spectra directly on the chromatographic plate. Finally, the structural characterization of the mauveine A molecule, one of the main components of mauve was carried out aided by DFT computational chemistry techniques. Besides, the vibrational analysis of the molecule was also done. This work was carried out in collaboration with Dr. Marco Leona, at the Metropolitan Museum of Art of New York.

The work consisting in the application of Raman spectroscopy and SERS technique to the study of pigments employed in ancient Islamic manuscripts from Morocco was highly advanced. The use of Ag nanoparticles applied on certain areas of coloured inks of the manuscripts and the employ of confocal Raman, allowing an increase of the

spatial resolution of the measurements, have revealed the presence of anthraquinone pigments in these manuscripts. We are currently investigating the possible presence of organic pigments by SERS in ink marks of showing yellow and pink colors, and also the possible existence of saffron extracts in the black ink to account for the better preservation against the degradation by humidity and time. 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.

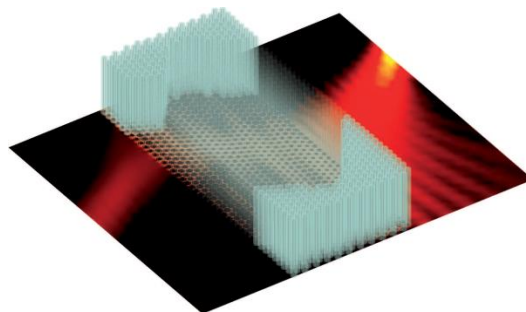
Old building materials from the Cultural Heritage were made with puzzolanic mortars and some studies regarding the possible metastable phases formation is unclear. In collaboration with the Eduardo Torroja Institute for Construction Science (CSIC) the conversion reaction of metastable phases at long 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

LOW-LOSS OPTICAL NEGATIVE-INDEX METAMATERIALS:

Recently, many fascinating properties predicted for metamaterials (negative refraction, superlensing, electromagnetic cloaking...) have been experimentally demonstrated. Unfortunately, the best achievements have no direct translation to the optical domain, without being burdened by technological and conceptual difficulties. Of particular importance within the realm of optical negative-index metamaterials (NIM), is the issue of simultaneously achieving strong electric and magnetic responses, and low associated losses. Here, hybrid metal-semiconductor nanowires are proposed as building blocks of optical NIMs. The metamaterial thus obtained, highly isotropic in the plane normal to the nanowires, presents a negative index of refraction in the near-infrared, with values of the real part well below -1 , and extremely low losses (an order of magnitude better than present optical NIMs). Tunability of the system allows one to select the operating range in the whole telecom spectrum. The design is proven in configurations such as prisms and slabs (see figure), directly observing negative refraction.



SEMICONDUCTOR NANOWIRE PHOTOLUMINESCENCE

We have developed a simple theoretical model to characterize single nanowire photoluminescence, with special emphasis on the enhancement and directionality of the emitted polarized light. Nanowires behave as efficient optical nanoantennas, with emission characteristics that are not only given by the material but also by their geometry and dimensions. We show that the radiated power is governed by the dipole emission coupling into guided/leaky modes supported by the nanowire for given frequency and diameter, its length determining in turn the size of the effective (Fabry-Perot like) cavity in which the modes bounce back and forth with their corresponding wavevectors. 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, Amsterdam, and Philips Research Labs, Eindhoven).

INVISIBLE METAL NANOWIRES

Metallic nanowires coated with a high permittivity dielectric are proposed as means to strongly reduce the light scattering of the conducting nanowires, rendering them transparent at infrared wavelengths of interest in telecommunications. Based on a simple, universal law derived from electrostatics arguments, we find appropriate parameters to reduce the scattering efficiency of hybrid metal-dielectric nanowires by up to three orders of magnitude as compared with the scattering efficiency of the homogeneous metallic nanowires. We show that metal@dielectric structures are much more robust against fabrication imperfections than analogous dielectric@metal ones. The bandwidth of the transparent region entirely covers the near IR telecommunications range. Although this effect is optimum at normal incidence and for a given polarization, rigorous theoretical and numerical calculations reveal that transparency is robust against changes in polarization and angle of incidence, and also holds for relatively dense periodic or random arrangements. A wealth of applications based on metal-nanowires (photovoltaics, on-chip connections) may benefit from such invisibility.

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.
- Computational 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.

In previous years' reports, we discussed our results along the astrobiology line of work, concerning the glycine and alanine aminoacids. We have further extended our work in this area by studying ions involved in different degree in glycine or alanine chemical reactions, namely cyanate, bicarbonate and carbamate. As before, our main tool was infrared spectroscopy, supported by quantum chemical calculations. We have discussed the possible astrophysical implications of our models and our results, of which we shall mention just two examples. The hyperquenching technique that we use in most works allows the formation of compact ices, which can be considered as good analogues for astrophysical systems; we can thus follow the transformations of such samples under varying conditions of concentration and temperature. Cyanate transforms into bicarbonate spontaneously in water solution at ambient temperature. This reaction is very unlikely though in astrophysical particles, unless it is favored by energetic bombardment, e.g. in the core of hot diffuse clouds, or by temperature increase in objects in close vicinity of the Sun; we have estimated the most likely conditions for the observation of bicarbonate from astrophysical media. Finally in this section it is starting to characterize minerals such as phyllosilicates, which have a strong presence in celestial bodies.

Two of our collaborations with other research groups deal with ices of CO_2 and H_2O . In one of them, with researchers of the University of British Columbia, Vancouver, we predicted the spectra of CO_2 and H_2O aerosol particles expected to be present in the upper atmosphere of Mars. In the second one, with Muñoz Caro's group at CAB, we have studied the crystallization process of CO_2 ice at very low temperature and very slow ice growing conditions. We found that a specific IR band could be assigned to the amorphous phase of CO_2 , disappearing when the crystalline phase grows, either by increasing temperature or by slow accumulation of monolayers. By comparison with astrophysical observations, where this band has never been found, we conclude that pure amorphous CO_2 ice has not been detected so far in any astronomical media.

We have also published our first determination of near- and mid- infrared optical constants for astrophysical relevant systems, in this case NH_3 and NH_3/N_2 mixtures, using new software developed in our group, and based on our mid- and near-IR spectra. We are confident that this work will attract important attention, since the astrophysical community has frequently stated the need to derive this kind of optical information, necessary to interpret spectroscopic observations.

Regarding atmospheric studies, we have concluded a theoretical study on thermodynamical and kinetic 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 Dr. Alfonso Saiz-López, from the Instituto de Química Física "Rocasolano", CSIC, and Prof. John Plane from the University of Leeds. In addition to our theoretical study, laboratory experiments have been carried out in U. of Leeds, giving results that confirmed our theoretical predictions. The agreement and complementarity of both studies have led us to propose a mechanism of particle iodine oxides polymerization. Furthermore, we have started to study in the mid- and far infrared regions, spectra of the atmospheric aerosol described as mineral powder, which is basically composed of phyllosilicates such as smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to 50 nm of quartz, feldspar, calcite, iron and aluminum oxides, silicon and also gypsum.

Kinetics of cold plasmas and plasma wall interactions

We have pursued our previous studies on the kinetics of $\text{H}_2 + \text{N}_2$ plasmas and have extended them to very low proportions of N_2 . These studies, carried out in hollow cathode discharges and based essentially on mass spectrometric measurements of neutrals and ions, have provided conditions with very different relative weights of the three relevant protonated ions (H_3^+ , N_2H^+ , y NH_4^+). Using a kinetic model of the plasma we have been able to analyze in detail the proton transfer chains between these three species and the general prevalence of NH_4^+ . This ion, essentially produced from the small amount of ammonia formed at the reactor walls, is predominant even for relative abundances of NH_3 of the order of 1%. The high stability of NH_4^+ in an environment dominated by H_2 and by the rest of small molecules common in the interstellar medium suggests that it can be relatively abundant in space. The ammonium ion had never been detected in the interstellar medium due to the absence of a dipole moment in the wholly protonated species, but there was a possibility to observe its deuterated variants. To that end we have collaborated in the improvement of the experimental determination of the 1_0-0_0 rotational frequency of NH_3D^+ (See research line “laser spectroscopy” of our department). For the generation of this ion we have also used a hollow cathode discharge. The new data have allowed the identification of the ion in the interstellar medium. The results of these experiments together with other from previous works were presented in a plenary lecture at the International Conference on Phenomena in Ionized Gases (31st ICPIG)) and in an invited lecture at the International Conference on Research and Application of Plasmas “Plasma 2013”.

We have also set up a procedure for the diagnostics of energies and densities of ions in hydrogen plasmas based on the comparison between mass spectrometric measurements of ions and the broadening of the H_α lines of the Balmer series of atomic hydrogen observed by high resolution emission spectroscopy.

In collaboration with the group “Transient plasmas in planetary atmospheres” of the Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), and using emission spectroscopy of N_2 and N_2^+ in laboratory plasmas at low air pressures, we have refined various methods for the determination of gas temperatures in transient luminous events (TLEs) like Halos and Sprites, that take place in the stratosphere of the Earth, above thunderstorms. The reliability of the different procedures has been assessed under different circumstances.

We have also started a new set of experiments aimed to the generation of carbonaceous films and dust particles using radiofrequency plasmas of He and CH_4 mixtures. In collaboration of the “Ices” lab of our department the deposited films have been characterized by means of FTIR spectroscopy. The generated films have then been irradiated with electron beams (2keV) and with UV light. Possible changes in the characteristic IR bands have been analyzed. The first results of these studies will be presented as an invited talk in a forthcoming Faraday Discussion (168) on “Astrochemistry of Dust, Ice and Gas”, to take place in Leiden (Holland) in April 2014.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

The research carried out thus far on the reactivity of muonium (Mu) with H_2 has been recapitulated in a “topical review” article. Classical and quantum mechanical results are compared, and the effects of zero point energy, tunneling, and vibrational adiabaticity on the reaction dynamics are discussed at length.

We have also studied the effects of vibrational excitation on the $\text{S}^+ + \text{H}_2(\text{v}) \rightarrow \text{SH}^+ + \text{H}$ reaction and its possible astrophysical implications. Rate coefficients for specific vibrational states were derived from quasiclassical trajectory (QCT) calculations. The reaction is endothermic, and very slow for the vibrational states $\text{v}=0$ and 1, but the rate grows by orders of magnitude when $\text{v} > 1$. The use of these rate coefficients in astrophysical models indicates that the reaction studied could be one of the main sources of SH^+ in some interstellar environments like photon dominated regions (PDRs).

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The Group of Molecular Fluid Dynamics is specialized in the quantitative study of fluid flows out of equilibrium. We have continued along 2013 the study of these flows at the interface between the microscopic description, essentially molecular and quantum, and the macroscopic one, governed by the continuum fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods. 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.

At present, the Laboratory of Molecular Fluid has two complete instruments for jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twenty years, whose performance and flexibility are unique worldwide. One

(A) is adapted to produce gas and liquid jets from cryogenic nozzles, and the other (B) to produce gas jets out of liquid substances from hot nozzles.

In instrument (A) we have carried out two series of experiments on oxygen, using the special pumps for this gas acquired recently: i) expansions of O₂ mixtures (2.5%, 10% and 50%) in He from a nozzle at room temperature, in order to measure the rotational relaxation of O₂ by inelastic collisions with He; ii) expansions of O₂ mixtures (0.5%, 2%, and 5%) in He from cooled nozzles at 63 and 75 K, aimed at producing dimers and other small clusters of O₂. In the latter experiments have achieved temperatures as low as ~2 K, what allowed to observe for the first time the relaxation between the levels of the fine structure triplet due to electronic spin, split by just 2 cm⁻¹.

In order to study the H₂O:H₂ and H₂O:D₂ inelastic collisions, of great astrophysical interest, we measured at instrument (B) several series of Raman spectra of pure *para*-H₂, *normal*-H₂, *ortho*-D₂, and *normal*-D₂ gas jets, along with very dilute mixtures of gaseous H₂O in them, from a 350 micron nozzle at 363 K, using the new controlled evaporator-mixer recently installed. It was checked that all those jets were free from H₂O condensation, a must for the quantitative analysis of the collisional kinetics, which is currently underway.

We have continued analysing the H₂O:He and H₂O:H₂O inelastic collisions from the time evolution of the rotational populations of H₂O (gas) in supersonic jets, obtained by Raman spectroscopy. Unlike other systems such as O₂ or N₂, previously studied by our group, we observed that the population of the rotational energy levels of H₂O progressively deviates from the Boltzmann distribution, affecting the collisional dynamics to a significant extent. Furthermore, this complicates the collisional analysis because it prevents to define a rotational "temperature", forcing us to work with individual rotational populations. Our measurements allowed determining average rate coefficients for H₂O:H₂O collisions for the 8 lowest levels of *ortho*-H₂O at 100K, which cannot be calculated to date by theoretical methods, and 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.

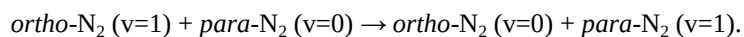
On the other hand, we have continued the analysis and interpretation of the Raman spectra of liquid microjets (filaments) of *para*-H₂ and *ortho*-D₂ mixtures (1%, 3%, 5%, 9%, 17%, 52%, 84%, and 96%), in a joint project with the University of Frankfurt (Germany). These filaments, about 5 microns in diameter, are cooled by surface evaporation in vacuum, yielding liquid samples highly undercooled below their melting point, until they eventually solidify. Raman spectra of these filaments at different axial distances allow us to track the crystallization process with a time resolution of ~10 ns. Thus, it was found that small amounts of isotope impurities delay significantly the crystallization of *para*-H₂ and *ortho*-D₂, an effect of quantum origin not observed previously.

Finally on the computational side, we have recalculated the state-to-state rate coefficients for inelastic collisions of H₂ molecules, and for the first time those of D₂ and HD in all isotopic variants, between 20 and 300 K. By using these calculated rates and published experimental data on ultrasound absorption, we have checked the relaxation equations previously developed in our laboratory, validating the rate coefficients for the H₂, D₂, and HD system, as well as the employed potential energy surface.

LASER SPECTROSCOPY

High resolution studies have been carried out, using the technique of stimulated Raman spectroscopy, in several molecular species:

- Nitrogen (N₂). In this case the Raman-Raman double resonance variation of the SRS technique was used. This variation uses Raman optical pumping to promote a significant fraction of the vibrational population in the ground state to a vibrationally excited state, namely v=1, after which the excited state is probed through stimulated Raman spectroscopy. The setup was first used to study the v=2 ← v=1 transition and obtain, with rotational resolution, the molecular parameters that characterize the upper v=2 state. After this, the focus of the experiment was shifted to the determination of the rate of collisional (vibrational) energy transfer in N₂, taking advantage of the possibilities offered by the existence of two nuclear spin varieties, *ortho*- and *para*-N₂. A single rotational level of the v=1 vibrational state of *ortho*-N₂ was populated and, after introducing controlled delays, the emergence and evolution of *para* rotational population in that same vibrational state v=1 was monitored. Since direct *ortho-para* collisional conversion is effectively forbidden under our experimental conditions (pressure and time scale), all the *para* population appearing in v=1 cannot have arrived there through direct rotational relaxation from *ortho* states within v=1, but has instead reached that state through the vibrational energy transfer path



From the temporal evolution of the relative populations of both nuclear spin varieties the collisional energy transfer rate was deduced. The experiments were carried out at a temperature of 77 K. We are planning to extend the measurements to other temperatures and to explore the possibility of climbing one additional step in the vibrational ladder, from $v=1$ to $v=2$.

- Nitrogen-perturbed acetylene ($C_2H_2-N_2$).
We measured the collisional broadening of the Q-branch lines of the n_2 band of acetylene perturbed by nitrogen. The measurements were carried out both at room temperature and at 150 K, and the broadening data obtained were used to validate potential energy surfaces proposed for this collisional pair through semiclassical models of collisional broadening. The agreement between experiment and calculation was quite satisfactory within the experimental error intervals.
- Raman spectroscopy in hollow-core photonic crystal fibers.
We have concluded this experiment, showing a sensitivity enhancement of $\times 28000$ over the single-focus regime, and signal to noise ratios comparable with those of the quasi-continuous technique.
- IR spectroscopy of molecular ions.
We have finished the installation of a hollow cathode reactor with multipass optics in the IR difference frequency laboratory, in collaboration with the cold plasma group. We have studied the deuterated ammonium ion (NH_3D^+). This work has been done in the frame of the Consolider-Astromol CSD2009-00038. The ammonium ion NH_4^+ is a fundamental precursor of other nitrogen-containing and prebiotic molecules in the interstellar medium. However, due to the lack of a permanent electric dipole moment, it cannot be detected by radio-astronomy methods. However, its deuterated variant NH_3D^+ does have a small dipole moment of 0.26D, so it can be detected in space through its rotational spectrum. We have produced the ion in the hollow cathode reactor, detected it (at the $\sim 10^{-10} \text{ cm}^{-3}$ level), measured its ν_4 band and refined its spectroscopic constants. From those we have made a highly accurate prediction of the frequency of the 1_0-0_0 rotational transition, which, in turn, has allowed confirming the detection of NH_3D^+ in Orion IRc and in the cold prestellar core B1b, by astrophysicists from Astromol and from other foreign institutions.

We have also measured highly accurate vibration-rotation frequencies of $^{36}\text{ArH}^+$ y $^{38}\text{ArH}^+$. It must be noted that the natural abundance of ^{36}Ar and ^{38}Ar on earth is 0.3% and 0.06%, respectively. However, in space, the most abundant isotope is ^{36}Ar , followed by ^{38}Ar , and, recently, $^{36}\text{ArH}^+$ has been identified from Herschel spectra in the Crab Nebula. Given the high opacity of our atmosphere at the frequency of the rotational transitions of these molecules and the end of the Herschel mission, future studies of ArH^+ in space will rely on infrared observations, facilitated by our laboratory data.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have developed the study of control of alignment and orientation of isolated polar molecules, using a combination of static electric field and non-resonant intense laser pulses. We have shown that a series of pulses of slowly increasing amplitude allows for a significant simultaneous alignment of molecules in several initial $|J,M\rangle$, ($J \leq 6$, $M \leq J$) quantum states. This leads to near optimum alignment of an initial molecular ensemble at low T.

We have optimized the orientation of an isolated dipolar molecule using an optimized sequence of laser pulses in presence of a rather weak static field. We use adiabatic/diabatic traversing of a quasienergy crossing involving the oriented-antioriented pair of states and an ancillary high J state. We have achieved a reversible control of transitions between the oriented/antioriented pair with high fidelity. This pair forms the basis for the realization of a qubit with ultracold dipolar molecules.

Previous developments are based in the adiabatic evolution of a Floquet Hamiltonian. We have explored the use of these techniques to coherently de-excite and align a molecule initially in a very high J, low M state.

Ultracold Quantum gases

We have pursued the study of orientation control of dipolar molecules in a tight-binding optical lattice. We have shown that the combination of orientation control at each node and long-range dipole interaction allows for a detailed control of molecular entanglement. When the orienting field at each node is identical, symmetry restrictions follow. We have studied the effect of controlled removal of this symmetry by applying different intensity patterns to different nodes. This allows a controlled access to asymmetric many-molecule states and opens up new possibilities for entanglement control.

On the other hand, the interaction between highly strongly oriented dipolar molecules strongly depends upon the angle formed by laser polarization and intermolecular axis, leading to an interaction ranging from attractive to repulsive. We have shown that adiabatic change of the laser polarization axis induces crossings among pendular states, providing a new handle to control of molecular entanglement.

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.
- Nanostructuration in polymer systems.

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.
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM)

RESEARCH ACTIVITY:

Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS.

Conformational Relaxations in Confined PET

The research collaboration with Dr. Marco Pieruccini (CNR Modena, Italy), initiated a few years ago, has been extended this year to the study of the confinement of the amorphous regions in semicrystalline polymers on the basis of microindentation hardness and dynamic mechanical spectroscopy (DMS). Semicrystalline poly(ethylene terephthalate) (PET) has been employed as a model to gain information on the nature of the confined amorphous regions, especially those located between lamellar stacks (amorphous pockets, APs). PET was crystallized from the glassy state at low and high temperatures ($T_c = 100$ °C and 160 °C, respectively) and recrystallized some degrees above. DMS studies reveal two segmental relaxation processes ascribed to the interlamellar amorphous regions (slow mode) and to the interstack amorphous pockets (APs) (fast mode) respectively. It is shown that recrystallization changes the cooperativity within the APs: At low T_c , DMS analyses reveal an increase in the cooperativity and the free energy barrier for readjustment after recrystallization. Concurrently, indentation measurements show an enhancement of the average hardness value of the amorphous regions, H_a . The reduced size of the APs upon recrystallization is discussed as a relevant parameter giving rise to an enhanced segmental confinement and a parallel hardening. In contrast, results for the high T_c material reveal that, in this case, both the cooperativity and H_a decrease upon recrystallization. The influence of the coupling of the APs with the crystal walls, on the relaxation mode and in turn on the mechanical behaviour of the material, is envisaged to be a possible mechanism underlying these observations.

Depth-sensing Indentation applied to Polymers: a Comparison between Standard Methods of Analysis

A recent collaboration with Drs. Joan Josep Roa Rovira and E. Rayón, from the Politechnic University of Barcelona and Valencia respectively, approached the application to polymers of the most widely accepted methods of analysis of nanoindentation data. Hardness and elastic modulus values are often extracted from instrumented indentation testing assuming linear elasticity in the initial portion of the unloading. The method is widely accepted for metals and ceramics, however it is still a matter of controversy when applied to polymer materials due to their time-dependent behaviour. On the other hand, Loubet and co-workers used continuous stiffness measurements (CSM), consisting of superimposing a small oscillation to the quasi-static component of loading, to study the mechanical properties of polymers and proposed a new model to analyse indentation data. Our work in collaboration with Drs. Roa and Rayón offered a comparative study between Loubet's model using CSM and the procedure based on the onset of unloading. A wide range of thermoplastic materials including glassy and semicrystalline polymers have been investigated. The advantages and disadvantages of each procedure have been analyzed. Most interesting has been the observation that the differences found between the results obtained from both approaches relate to the nature of the polymer material, more specifically, to their glass transition temperatures. Also relevant has been the comparison between mechanical data extracted from indentation measurements and those from classical dynamic mechanical analysis.

Nanoindentation on Inorganic Fullerene reinforced Thermoplastic Matrices

The reinforcing effect of inorganic fullerene-like tungsten disulphide (IF-WS₂) nanoparticles in two different polymer matrices, isotactic polypropylene (iPP) and polyphenylene sulphide (PPS), has been investigated in collaboration with experienced researchers in the field of polymer nanocomposites, Prof. Marián Gómez-Fatou and Dr. Ana Díez Pascual, both of them working at the ICTP, CSIC, and Dr. Mohammed Naffakh, at the Politechnic University of Madrid. Dynamic depth-sensing indentation has been used for this purpose. We have carried out a thorough analysis of the hardness and elastic modulus enhancement upon filler addition. It has been found that there are two main contributions to the mechanical enhancement: changes in the polymer matrix nanostructure and intrinsic properties of the filler including matrix-particle load transfer. The latter seems to mainly determine the overall mechanical improvement, whereas the nanostructural changes induced in the polymer matrix only contribute to a minor extent. Important differences have been suggested between the mechanisms of deformation in the two nanocomposites resulting in a moderate mechanical enhancement in case of iPP and a remarkable hardness increase in case of PPS. The nature of the polymer amorphous phase (whether in the glassy or rubbery state) has been suggested to play here an important role.

NANOESTRUCTURATION OF SOFT CONDENSED MATTER WITH CONTROLLED MORPHOLOGIES

NANOFABRICATION OF POLYMER STRUCTURES

Polymer Nanogratings

We have continued to exploring the possibilities of using lasers in order to nanostructure the surface of polymer thin films. In cooperation with the group of Dr. M. Castillejo (IQFR -CSIC) we have succeeded in the nanofabrication of laser-induced periodic surface structures (LIPSS) with femtosecond laser pulses in a series of thin polymer films prepared by spin-coating including poly (ethylene terephthalate) , poly (ethylene terephthalate trimethylene) and poly (bisphenol A carbonate) . The irradiation produces characteristic nanogratings with periods similar to the laser wavelength. The structural information obtained by both atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence small angle x-ray scattering (GISAXS) correlate satisfactorily. Modeling of the LIPSS GISAXS patterns suggests that these structures can be well described asquasi unidimensional paracrystalline lattice.

Polymer Nanostructuring by Optical Near Fields

In collaboration with Dr. Jan Siegel of the Institute for Optics (IO-CSIC) we have exploited the application of optical near fields to nanostructuring of polymers. By exposure to a single ultraviolet nanosecond laser pulse, the spatial intensity modulation of the near-field distribution created by a silica microsphere can be imprinted into the films. Our experiments demonstrate that nanopatterning in polymers is mainly triggered by ablation. These experiments suggest the suitability of using optical near fields for structuring polymer films, opening up new possibilities for nanopatterning and paving the way for potential applications where optical near fields and polymer nanostructures are involved.

Functional Surfaces for applications as non-volatile memories

We have explored the use of ferroelectric polymers to produce non-volatile memories with nanoscopic resolution. In this sense, well-defined low aspect ratio nanostructures based on nanogratings on thin films of poly(vinylidene fluoride-co-trifluoroethylene) copolymers have been prepared by means of Nano Imprint Lithography (NIL). By using these nanogratings, an improved management of writing and reading information of about 500 Gbit/in² (0.01 bit/nm²) can be reached as revealed by Piezoresponse Force Microscopy (PFM). Structural investigation by means of X-ray diffraction techniques indicates that the physical confinement generated by nanoimprint promotes the development of smaller and edge-on oriented crystals. Our results evidence that one-dimensional nanostructuring can be a straightforward approach to improve the control of the polarization in ferroelectric polymer thin films.

Polymer nanoarrays by using Alumina templates

We demonstrate by scanning X-ray microdiffraction, using synchrotron light, the heterogeneous character of high aspect ratio one-dimensional nanoarrays of ferroelectric poly(vinylidene fluoride-co-trifluoroethylene) copolymers and poly(tri-methylene terephthalate) supported by a residual polymer film. They were prepared by melt and solution template wetting, using porous anodic aluminum oxide (AAO) as a template. For the ferroelectric copolymers the spatial evolution of different polymorphs from the mixture of paraelectric and ferroelectric crystal forms (residual film) to the pure ferroelectric form (nanoarray) is evidenced for the samples prepared by solution wetting. However, for samples prepared by melt wetting the ferroelectric phase is exclusively obtained in both the residual film and nanoarray. The crystal nuclei formed in the polymer film connected to the nanoarray play a key role in determining the formation of a crystallinity distribution gradient, where the crystallinity decreases along the first 5–10 microns in the nanorods reaching a steady value afterwards. These results reveal key aspects of importance for improving the ferroelectric character of polymer nanostructures.

For poly(tri-methylene terephthalate) and its nanocomposites with single wall carbon nanotubes (SWCNT) an accurate study of the crystalline orientation has been accomplished. While polymer residual film exhibits isotropic character, edge-on lamellae are formed upon approaching the polymer/membrane interface.

At the interface, edge-on and flat-on crystalline lamellae coexist as a consequence of the strong interaction between the polymer and the AAO surface. Inside the nanopores, the confined environment induces a kinetic selection of polymer crystals which only allows the growth of crystalline lamellae with its *a*-axis parallel to that of the pore. In the case of PTT/SWCNT nanocomposites, this effect, in conjunction with the strong interaction between polymer and AAO surface, seems to prevail over the templating effect of the carbon nanotubes and a similar orientation to that of the neat PTT case is observed.

Also by alumina templates we have developed new crystallization strategy for achieving a completely oriented crystallization of ultrasmall polymer rods (20 nm in diameter) on poly(ethylene oxide) (PEO) by inducing crystal nucleation centers exclusively at one of their tips. In PEO nanocylinders with small enough diameter, crystallization is inhibited. However, it can be promoted in the form of lamella with nearly monocrystal characteristics by means of aluminium nucleation at the tip of the cylinder.

For polymers with impact in photovoltaics, we have developed a simple and controllable fabrication of ordered arrays of poly(3-hexylthiophene) (P3HT) solid nanowires and hollow nanotubes by infiltrating the molten polymer into AAO nanopores at temperatures promoting partial or complete wetting regimes, respectively. We show that such wetting regimes (and thus the formation of nanowires or nanotubes) are associated with a different internal structure in the P3HT melt.

Polymer nanospheres

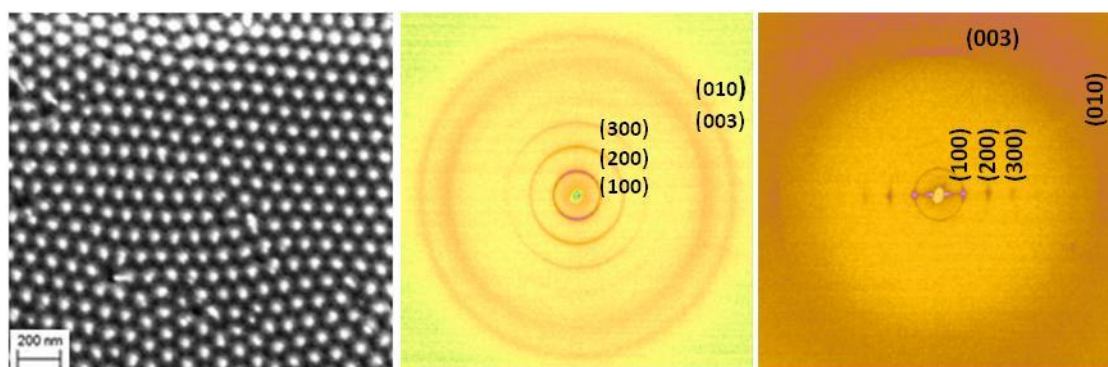
Polymer nanospheres with different size distributions of poly(ethyl methacrylate) are prepared by two different methods, with and without the aid of a surfactant. The calorimetric trace of these spheres shows an increase of the glass transition temperature that has been evaluated by means of an entropy model. This 3D-confinement, imposed by the nanospheres, leads to a limiting number of repeating polymer units in the sphere and thus to a reduction of the possible configuration states of the polymer chains, which is ultimately related to variations in the bulk value of the glass transition temperature.

ORDER AND CHAIN ALIGNMENT IN THIN FILMS AND NANOPILARS OF CONDUCTING POLYMERS

We have investigated thin films and nanopilars of poly(2,5-bis(3-hexadecylthiophen-2-yl)thieno[3,2-b]thiophene) also known as PBTTT and its blends with [6,6]-Phenyl-C71-butyric acid methyl ester (C70 PCBM).

Thin films with different thickness of PBTTT and its blend with PCBM were prepared by spin-coating, the morphology of the polymer films was examined via AFM and the internal structure was investigated by Grazing Incidence Wide Angle X-ray Scattering (GIWAXS). It can be concluded that for the PBTTT thin films the AFM is characterized by terraces with step heights of ~ 2.2 nm and the GIWAXS patterns display a (h00) series of peaks, whose lattice spacings d_{100} are in good agreement with the measured step height by AFM. This indicates that the film consists of highly uniform flat lamella. The order is improved for the thinnest sample (40 nm) and it is distorted for the PBTTT/ PCBM blend.

Nanopilars from the same materials were prepared by solution wetting of ordered anodic aluminum oxide (AAO) membranes with pores of 40 nm diameter. The internal structure of the nanopillars was investigated by X ray microdiffraction. The diffraction pattern from the PBTTT nanopillars suggests a highly oriented crystalline structure compared to that of the residual PBTTT film. From the pronounced crystal texture exhibited it can be concluded that inside the porous alumina the PBTTT nanopillars consist of face-on-lamellae concentric with respect to the alumina walls. Let's comment that the π - π stacking is also concentric to the nanopillars.



(Left) Scanning Electron Microscopy (SEM) image of the fabricated polymer nanoarray with a membrane of 40 nm pores. 2D Microdiffraction patterns of PBTTT: (middle) Material outside of the membrane, (right) material confined into 40 nm diameter pores. Pores long axis is vertical.

ATOMIC FORCE MICROSCOPY (AFM)

During the year 2013 the AFM setup has been implemented with a system that allows the realization of electrical measurements (Kelvin Probe) simultaneous with the visualization of nanoscopic structures. This option complements the evaluation of mechanical properties (elastic modulus, adhesion forces, deformation and nanoindentation) and the measurement of the piezoelectric effect (PFM). The new features enable the measurement of electrical current through the AFM tip with nanometer resolution. The technique has been successfully tested on conducting polymer nanofilms.

TUNING DICHROIC PLASMON RESONANCE MODES OF ANISOTROPIC GOLD NANOPARTICLES

In collaboration with the group of Prof. A.R. González Elípe (Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC), it has been proved a method to tune the gold surface plasmon resonance (SPR) modes by growing anisotropic nanoparticles of gold into transparent SiO₂ thin films prepared by glancing angle deposition (GLAD). In this type of composite film, the anisotropy of the gold nanoparticles, proved by grazing incidence small angle X-ray scattering (GISAXS), is determined by the tilted nanocolumnar structure of the SiO₂ host and yields a strong film dichroism evidenced by a change from an intense colored to a nearly transparent aspect depending on light polarization and/or sample orientation. The formation in these films of lithographic non-dichroic SPR patterns by nanosecond laser writing demonstrates the potentialities of this procedure to develop novel optical encryption or anti-counterfeiting structures either at micrometer- or macroscales.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS (BIOPHYM)

MULTISCALE SIMULATION OF PHYSICAL PHENOMENA IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Computer simulations studies about catalysts systems for the polymerization process

We have carried out a deep review, which is under consideration for publication in *Organometallics*. This work is focused on the application of 3D-QSAR chemometric methods for the analysis of the relationship between the structure of single site catalysts and their activity in the polymerization of olefins. Our group has pioneered this type of applications aimed at developing new and more efficient catalyst systems in a predictive way.

Study of the influence of branching on the early stage of nucleation and crystal formation of fast cooled ultralong n-alkanes as revealed by computer simulation

Linear and branched ultralong alkanes with a chain length between 130 and 390 carbon atoms are considered as model materials for studying the mechanism of chain folding and the crystallization process of polymers. We have performed molecular dynamics (MD) simulations on a series of ultralong *n*-alkanes in order to shed light on the early stage processes of the crystallization from the melt at high undercooling. The study contemplates a linear and two symmetrically branched ultralong *n*-alkanes. It is observed that the branch provokes a delay of the nucleation as compared to the linear chain. Additionally this process is further delayed as the branch length increases. To follow the process we compute the time evolution of the structure factor and crystallinity as the material is undercooled. It is obtained that both crystal thickness and chain packing are dramatically affected by the branches. The crystallinity also decreases as the length of the branch increases. The observed folding in the linear system is closer to the irregular folding model at least for the early stages of the process. The length of the branch determines its inclusion or not in the nuclei and consequently it disturbs in a different way the formation of the crystals.

Simulation of thermophysical properties of the Ionic Liquids

The properties of the tetracyanoborate-based ionic liquids (ILs) 1-ethyl-3-methylimidazolium tetracyanoborate ([EMIM][B(CN)₄]) and 1-hexyl-3-methylimidazolium tetracyanoborate ([HMIM][B(CN)₄]) obtained by experiments and molecular dynamics simulations have been studied. Experimental techniques have been applied for the determination of refractive index, density, interfacial tension, and self-diffusion coefficients for [HMIM][B(CN)₄] at atmospheric pressure in a range of temperatures. In addition, surface light scattering experiments have provided viscosity and interfacial tension data. As no complete molecular parametrization is available for the MD simulations of [HMIM][B(CN)₄], a recently developed united-atom force field for [EMIM][B(CN)₄] has been transferred to the homologous IL [HMIM][B(CN)₄]. We have found that deviations between our simulated and experimental data for the equilibrium properties are less than ±0.3% in the case of density and less than ±8% in the case of interfacial tension for both ILs. Furthermore, the calculated and measured data for the transport properties are in good agreement, with deviations of ±30% over the whole temperature range.

Computational studies on the short chain branching effect in the melt dynamics of polyolefins

It has been necessary to know the structure and dynamics of polymer melts as a previous step for the study of the crystallization. The validation of the models was made by comparison of the simulations with experimental results

available in our research group. Furthermore, simulations have yielded parameters as the molecular weight between entanglements (M_e) and the relaxation time of entanglements (τ_e), very difficult to obtain experimentally. It has also been shown that the amount of SCB affects the molecular and the molecular dimensions and dynamics of entangled chains. The modeling and simulation have helped the interpretation of experimental results obtained by rheology in the research group (see the section below).

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

The molecular dimensions in dilute solution and the linear viscoelastic melt properties of model SCB copolymers have been studied. The results obtained in dilute solution show a molecular contraction as the branching level increases. Additionally, a dependence of the Newtonian viscosity with the SCB is obtained. Both experimental observations are in agreement with recent full atomistic simulations made in our group in this type of macromolecular systems. The dependences observed can be related to the changes observed in the macromolecular conformational features and also in dynamic features as the number of short chain branches increases.

The molecular features and the linear viscoelastic melt properties of polydisperse high density polyethylenes have been also investigated. The main molecular characteristic of the materials studied is the presence of high molar mass species. This molecular particularity strongly affects the Newtonian viscosity and the steady-state shear recoverable compliance. Both the third and the fourth moments of the molecular weight distribution correlates with the former viscoelastic properties, which follow the trend expected by the reptation model. The evidences clearly prove the effect not only of the polydispersity index, but more interestingly of the shape of the molecular weight distribution on the dynamics of the systems.

A combined study of microstructure and mechanical properties of model SCB copolymers has been done. The analysis focuses on the effect of SCB, which in turn modulates crystallinity and density, on the values of the elastic modulus. The variation found in the elastic modulus can be discussed in terms of the existence of a rigid amorphous phase, which controls the mechanical behavior of the materials. Mechanical coupling models for heterogeneous systems have been applied in order to describe the experimental results as a function of the three different phase fractions, i.e., crystalline, rigid amorphous and mobile amorphous. The phase fraction values obtained from the analysis of the mechanical properties are in qualitative agreement with those found experimentally in our group by Raman infrared spectroscopy and from the literature by positron annihilation lifetime spectroscopy. Concerning structural and morphological aspects, we have performed a preliminary study about the crystallization process of model SCB copolymers from dilute solution. We have applied differential scanning calorimetry, transmission electron microscopy and X-ray scattering and found a deep effect of SCB in the crystallin habits and the thickness of the single crystals. The results are in agreement with our recent computer simulations.

SIMULATION OF BIOMACROMOLECULAR SYSTEMS

Epidermal Growth Factor Receptors (EGFR)

EGFRs are associated with a number of biological processes and are becoming recognized as important therapeutic targets against cancer. We have provided models based on homology for the extracellular domains (ECD) of ErbB3 and ErbB4 in their active conformations, including a Heregulin ligand, followed by further refinement of the models by MD simulations at atomistic scale. We have compared the results with a model built for ErbB2 based on crystallographic information and analyzed the common features observed among members of the family, namely, the periscope movement of the dimerization arm and the hinge displacement of domain IV. Finally, we have refined a model for the interaction of the ECDs corresponding to a ErbB2–ErbB3 heterodimer, which is widely recognized to have a high impact in cancer development. On the other hand, Coarse Grained (CG) modeling has been applied to study the influence of the Trastuzumab monoclonal antibody on the structure and dynamics of the full ErbB2 receptor dimer, including the lipid bilayer. The CG model performs satisfactorily well, giving good matching with atomistic models as well as with experimental results on homolog receptors.

Bacteriocin AS-48 binding to model membranes and pore formation by coarse-grained simulations

Bacteriocin AS-48 is a membrane-interacting peptide that acts as a broad-spectrum antimicrobial against Gram-positive and Gram-negative bacteria. Prior Nuclear Magnetic Resonance experiments and the high resolution crystal structure of AS-48 have suggested a mechanism for the molecular activity of AS-48 whereby the peptide undergoes transition from a water-soluble to a membrane-bound state upon membrane binding. To help interpret experimental results, we have simulated the molecular dynamics of this binding mechanism at the coarse-grained level. By simulating the self-assembly of the peptide, we predict induction by the bacteriocin of different pore types consistent with a “leaky slit” model.

BIOPHYSICS: THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE AND HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

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

TRANSMISSION 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 matrices with different nanoparticles (i.e. titanium, carbon nanotubes, graphene and nanoclays), and 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: MCINN.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: January 2009-September 2013.

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.

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

Code or Reference: FIS2012-34479.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: January 2013-December 2015.

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

Descripción teórica de estructuras nucleares exóticas y reacciones.

Code or Reference: FIS2011-23565.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Pedro Sarriguren Suquibide.

Duration: January 2012- December 2014.

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

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.

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.

COST Action CM1002 “Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy”

Code or Reference: COST Action CM1002.

Main Researcher: Vincenzo Barone (University of Pisa, Italy) / IP IEM: M.L. Senent.

Duration: 2010-2014.

Objectives: It is an interdisciplinary COST Action which aims is creating a network dedicated to computational spectroscopy, i.e. to the extraction of structural and dynamical features of molecular and supramolecular systems by in silico analysis of spectroscopic observables.

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.

Cosmología de modelos de gravedad cuántica.

Code or Reference: i-Link0484.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Gianluca Calcagni.

Duration: January 2013-December 2014.

Objectives: Extract physically falsifiable predictions of models of quantum gravity when applied to the cosmology of the early (inflationary) and recent (dark energy) universe.

Marie Curie Action "International Outgoing Fellowships for Career Development.

Code or Reference: FP7-PEOPLE-2011-IOF ELECTROWEAK 298364.

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

Principal Investigator: Óscar Moreno Díaz.

Duration: May 2013- April 2016.

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

Fundamentos teóricos de la gravedad cuántica de lazos: métodos de teoría de campos y física estadística, álgebra de ligaduras y horizontes cuánticos-- Participation.

Code or Reference: FIS2012-34379

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor/ IEM: Fernando Barbero, member of the research team.

Duration: January 2013-December 2014.

Objectives: Research in quantum gravity (black holes), quantum field theory and statistical mechanics.

Ion Traps for Tomorrow's Applications (IOTA) --Participation.

Code or Reference: COST Action MP1001.

Funding Institution: COST Office, European Science Foundation.

Principal Investigator: Martina Knoop (Université d'Aix-Marseille) / Participation: Jordi Mur-Petit.

Duration: January 2011- December 2013.

Objectives: Developments in ion-trapping technology. Relevant energy and length scales. Interactions. Cold molecular ions. Hybrid systems.

Common perspectives for cold atoms, semiconductors, and nanoscience (POLATOM) --Participation.

Code or Reference: POLATOM.

Funding Institution: European Science Foundation.

Principal Investigator: Georgios Kavoulakis, T.E.I (Crete, Greece) / Participation: Jordi Mur-Petit.

Duration: January 2010- December 2015.

Objectives: Investigate links between cold atomic physics and semiconductor science. Study technological applications of research on nanoscopic and mesoscopic systems.

Technologies of quantum information with atoms, molecules and circuits--Participation.

Code or Reference: FIS2012-33022.

Funding Institution: MINECO.

Principal Investigator: Juan José García Ripoll (IFF-CSIC) / Participation: Jordi Mur-Petit.

Duration: January 2013- December 2015.

Objectives: Quantum simulation and detection of topological phases in optical lattices. Quantum simulation with quantum circuits and superconducting metamaterials. Quantum metrology with trapped ions. Quantum spectroscopic protocols for complex ions. Quantum simulation of quantum field theories in curved space-times.

Quantum Information Technologies in Madrid (QUITEMAD) --Participation.

Code or Reference: P2009/ESP-1594.

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

Principal Investigator: Miguel Ángel Martín-Delgado (UCM) / *Participation:* Jordi Mur-Petit.

Duration: January 2010- December 2013.

Objectives: Quantum computation. Quantum simulation. Quantum cryptography. Quantum control and tomography. Quantum entanglement

3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED 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 2014.

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

Surface-Enhanced Optical Spectroscopy Applied to the Structural Analysis and Detection of Peptides with Therapeutical Interest.

Code or Reference: I-LINK0646.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2013-December 2014.

Objectives: Study of the adsorption of therapeutical peptides on plasmonic nanoparticles aimed at drug delivery.

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/ Participation also of the QFT Dept.

Duration: January 2007-December 2013.

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

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

Code or Reference: FPA2009-07387.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2010- June 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.

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

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

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

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: November 2011-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 (EUROGÉNESIS-EXNUC).

Code or Reference: EUROCORES EUI2009-04162.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: May 2010- December 2013.

Objectives: Studies of reactions of astrophysical interest.

Óptica de Transporte de haz y diseño de un imán.

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

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2012-December 2014.

Objectives: Training of a technician in the international field.

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

Code or Reference: FPA2012-32443.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2013-December 2015.

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

Materiales Carbonosos Nanoestructurados para Atrapado y Confinamiento Molecular.

Code or Reference: MAT2012-33633.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2013-December 2015.

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

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

Code or Reference: IPT2012-0769-010000- 20125CP955.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad-FEDER.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2013-April 2015.

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

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

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

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Andrea Jungclaus.

Duration: January 2012-December 2014.

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.

Engineering METamaterials (EMET).

Code or Reference: CSD2008-00066.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación-CONSOLIDER-INGENIO.

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

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: January 2009-June 2014.

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.

Nanoantenas Ópticas Plasmónicas y Semiconductoras (NANOPLAS+).

Code or Reference: FIS2012-31070.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2012-December 2015

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

Caracterización y Control de Nanoestructuras generadas por irradiación láser-- Participation.

Code or Reference: CTQ2010-15680.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Marta Castillejo Estriano/ IEM: Luis Díaz Sol, member of the research team.

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.

Durabilidad y conservación de geomateriales del Patrimonio construido-- Participation.

Code or Reference: S2009/Mat-1629.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Rafael Fort González.

Duration: January 2010-December 2013.

Objectives: Study geomaterials (stone, mortars, bricks, etc.) surface characteristics involved in process and mechanism of deterioration.

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

Code or Reference: CSD 2007-00058.

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

Main Researcher: Felipe Criado.

Duration: 2007-2012. Prorrogado hasta diciembre de 2013

Objectives: Study of the Cultural Heritage by spectroscopic techniques.

Electrocatalisis de pilas de combustible: electroquímica de superficies y nuevos nanocatalizadores-- Participation.

Code or Reference: PLE2009-0008

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

Main Researcher: Ángel Cuesta.

Duration: 2009-2012. Prorrogado hasta Agosto de 2013.

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

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

Code or Reference: MAT2012-37005-C03-01

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Moisés Frias Rojas.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: New materials development with sustainability proposal.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

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

Code or Reference: FIS2012-38175

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Dionisio Bermejo Plaza.

Duration: January 2013-December 2015.

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

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) / Participation also of the ENVYMED Dept.

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: Víctor José Herrero.

Duration: January 2011- December 2014.

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 2014.

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.

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.

A search for deuterated ammonium ion in molecular clouds-- Participation.

Code or Reference:

Funding Institution: IRAM Observatory, St. Martin d’Heres (France).

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla/ IEM Participants: I. Tanarro, J. L. Doménech, M. Cueto and V. J. Herrero.

Duration: 1 December 2012 — 31 May 2013

Objectives: Detection of the deuterated ammonium with the 30 m telescope ion towards the B1-bS molecular cloud.

Thunderstorm effects on the atmosphere-ionosphere system-- Participation.

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.

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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 Bascuñana.

Duration: January 2010-December 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.

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

Code or Reference: MAT2012-36341

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: January 2013-December 2015.

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

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

Code or Reference: MAT2012-33517.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2013-December 2015.

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

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 angle X ray Scattering system.

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: January 2011-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: July 2011-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.

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: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: January 2012-December 2013.

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

Microscopic relaxation in disordered and ordered diblock copolymers studied by XPCS

Code or Reference: I-20120060 EC

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

Main Researcher: Alejandro Sanz Parras.

Duration: June 2012-June 2013.

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

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES / CONGRESSES AND MEETINGS

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

V Encuentro Gases Cuánticos en Madrid (*Regional congress*), Madrid (Spain), 14th of January 2013.

- *Escape from Quantum Lattice Billiards* (Invited talk), R.A. Molina, V. Fernández-Hurtado, J. Mur-Petit, and J.J. García-Ripoll.

KITP Program on Fundamental Science and Applications of Ultra-cold Polar Molecules (*International non-EU congress*), Santa Barbara (California, USA), 22nd of January-28th of March 2013.

- *Cold Molecules and Molecular Ions for Quantum Information and Viceversa* (Invited talk), J. Mur-Petit.

International Workshop on Pushing the Boundaries with Cold Atoms (*EU congress*), Stockholm (Sweden), 21st of January-15th of February 2013.

- *Integrable Pairing Models in Cold Atom Physics* (Invited talk), J. Dukelsky.

EFI Winter Conference on Canonical and Covariant LQG (*International non-EU congress*), Tux (Austria), 25th of February-1st of March 2013.

- *Hybrid Quantization of Inflationary Universes* (Invited talk), G.A. Mena Marugán.
- *Uniqueness Quantization Criteria in Cosmological Spacetimes* (Oral contribution), M. Fernández Méndez.

Quantum Gravity and Fundamental Cosmology (*International non-EU congress*), Albert Einstein Institute, Golm (Germany), 5th-8th of March 2013.

- *LQC versus Wheeler-DeWitt* (Oral contribution), G. Calcagni.

APS March Meeting 2013 (*International non-EU congress*), Baltimore (USA), 18th-22nd of March 2013.

- *Is Graphene on the Edge of Being a Topological Insulator?* (Oral contribution), J. González.

5th Jerte Advanced Relativity Workshop (*National*), Navaconcejo, 21st-24th of March 2013.

- *Hybrid Quantization of Inhomogeneous Universes with Inflation* (Oral contribution), G.A. Mena Marugán.
- *Introduction to Multifractal Spacetimes* (Oral contribution), G. Calcagni.
- *Emergent Electrodynamics in Helium-3 II* (Oral contribution), L. J. Garay.
- *Primordial Inhomogeneities from Inflation: A Review* (Oral contribution), M. Fernández Méndez.
- *Uniqueness of the Fock Quantization with respect to Mode Dependent Transformation* (Oral contribution), Daniel Martín de Blas.
- *Uniqueness Criteria for the Fock Quantization of Scalar Fields in Flat Cosmological Models* (Oral contribution), L. Castelló Gomar and G.A. Mena Marugán.

When RQI met AG (*International non-EU congress*), Nottingham (U.K.), 24th-26th of March 2013.

- *Black Holes... To Be or Not To Be, That is the Question* (Oral contribution), L.J. Garay.

Graphene Workshop (*International non-EU congress*), Ajdovščina (Slovenia), 8th-11th of April 2013.

- *Electronic Properties of Graphene* (Invited talk), J. González.
- *Confinement of Charge by Pseudomagnetic Fields in Graphene* (Invited talk), J. González.

CODECS 2013 Workshop (*EU congress*), El Escorial, Spain 18th-22nd of April 2013

- *Low Frequency Modes of Methyl Acetate* (Invited talk), M.L.Senent, M.Carvajal, I.Kleiner, and R. Domínguez-Gómez.

Ibéricos 2013: VIII Iberian Cosmology Meeting (*National congress*), Granada, Spain, 24th-26th of April 2013.

- *Inflationary Observables and Observational Constraints in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), G. Calcagni.

Quantum Phase Transitions in Molecular and Nuclear Structure 2013 (*International non-EU congress*), Huelva (Spain), 29th-31st of May 2013.

- *Composite Boson Mean Field Theory for Bosonic Systems: The 2D Hubbard Model* (Invited talk), D. Huerga, J. Dukelsky, and G.E. Scuseria.

Processus physico-chimiques d'intérêt astrophysique : La chimie de l'azote: Workshop (EU congress), Saint Florent (Corse, France), 3rd-6th of June 2013.

- *General Rule for the Reactivity of Anions in Interstellar Media and Detectability: Application to C_nH and C_nN anions* (Invited talk), M.Hochlaf and M.L.Senent.

Matrix Elements for the Double-Beta-Decay EXperiments, MEDEX13 (EU congress), Praga (Czech Republic), 11st-14th of June 2013.

- *Testing the Single-State Dominance Hypothesis* (Oral contribution), R. Alvarez-Rodriguez, O. Moreno, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, F. Simkovic, and A. Faessler.

V Encuentro Gases Cuánticos en Madrid (Regional congress), Madrid (Spain), 19th of June 2013.

- *Composite Boson Mean Field Theory for Bosonic Systems: The 2D Hubbard Model* (Invited talk), D. Huerga, J. Dukelsky, and G.E. Scuseria.

1st i-Link Workshop Macro-from-Micro: Quantum Gravity and Cosmology (International non- EU), Madrid (Spain), 24th-27th of June 2013.

- *Geometric Constraint Algorithm for Field Theories with Boundaries: a different Hamiltonian point of view*, (Invited talk), F. Barbero.
- *Loop Quantum Cosmology and Cosmological Perturbations* (Oral contribution), G.A. Mena Marugán.
- *Cosmology on Multifractal Spacetimes* (Oral contribution), G. Calcagni.
- *Black Holes... To Be or Not To Be, That is the Question* (Oral contribution), Luis J. Garay.
- *A Privileged Quantization of Cosmological Perturbations* (Oral contribution), M. Fernández Méndez.

XXXII International Workshop on Nuclear Theory (EU congress), Rila (Bulgaria), 24th-29th of June 2013.

- *Nuclear Structure Evolution in Mg Isotopes between Proton and Neutron Drip Lines* (Invited talk), M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov, and E. Moya de Guerra.

20th International Conference on General Relativity and Gravitation and 10th Amaldi Conference on Gravitational Waves (International non-EU congress), Warsaw (Poland), 7th-13th of July 2013.

- *Geometric Constraint Algorithm for Field Theories with Boundaries* (Oral contribution), F. Barbero, J. Prieto, and E. Sánchez Villaseñor.
- *An Inflationary Model in Loop Quantum* (Oral contribution), M. Fernández Méndez, G.A. Mena Marugán, and J. Olmedo.

XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 23º Encuentro Ibérico para la Enseñanza de la Física (National congress), Valencia (Spain), 15th-19th of July 2013.

- *Quantum Field Theory and prime numbers* (Oral contribution), J.F. Barbero, J. Navarro-Salas, and M.A. Sanchís-Lozano.

Loops 13 (International non-EU congress), Perimeter Institute, Waterloo (Canada), 22nd-26th of July 2013.

- *Hybrid Quantization of Cosmological Models with Inflation* (Oral contribution), G.A. Mena Marugán, M. Fernández Méndez, and J. Olmedo.
- *What does Quantum Gravity Teach us about the Very Early Universe?* (Round table), J. Grain, G.A. Mena Marugán, and D. Oriti.
- *Approximative Methods in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), D. Martín de Blas, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

HRMS 2013 Colloquium (EU congress), Budapest (Hungary), 25th-30th of August 2013.

- *Highly Correlated ab Initio Infrared Spectra of Molecules with Large Amplitude Torsional Modes: Dimethyl Ether, Methyl Acetate and Propane* (Poster), M. Carvajal, M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez, M. Villa, and I. Kleiner.

Kick-Off Meeting of Working Group V of the COST CoDECS action "Nuclear motion theory" (EU congress), Budapest (Hungary), 30th-31st of August 2013.

- *Detectable Organosulfur Compounds* (Invited talk), M.L.Senent, R.Domínguez-Gómez, M.Hochlaf, and M.Carvajal.

2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (Interational non-EU), Prague (Czech Republic), 1st-7th of September 2013.

- *Loop Quantum Cosmological Perturbations* (Oral contribution), M. Fernández Méndez, G.A. Mena Marugán, and J. Olmedo.

International Conference on Quantum, Atomic, Molecular and Plasma Physics (QuAMP 2013) (*International non-EU congress*), Swansea (U.K.), 8th-12th of September 2013.

- *Stabilizing a Frequency Comb Using Multi-Pulse Quantum Interferometry* (Poster), J. Mur-Petit.

The 22nd European Conference on Few-body Problems in Physics (*International non-EU*), Krakow (Poland), 9th-13th of September 2013.

- *Transitions Between Rotational Nuclear Few-Body States in the Continuum* (Oral contribution), E. Garrido.

Advances in Quantum Chaotic Scattering From (Non-)Linear Waves to Few-Body Systems (*International non-EU congress*), Dresden (Germany), 9th-13th of September 2013.

- *Escape from a Lattice Billiard* (Oral contribution), R.A. Molina.

IBER2013, XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (*National congress*), Sevilla, Spain 11th-19th of September 2013.

- *Detectable Organosulfur Compounds* (Invited talk), M.L.Senent, R.Domínguez-Gómez, M.Hochlaf, and M.Carvajal.
- *Highly Correlated ab Initio Infrared Spectra of Molecules with Large Amplitude Torsional Modes: Dimethyl Ether, Methyl Acetate and Propane* (Poster), M. Carvajal, M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez, M. Villa, and I. Kleiner.

Quantum Technologies Conference IV (*International non-EU*), Warsaw (Poland), 15th-20th September 2013.

- *Measurement and Control of Polar Molecules Using Trapped Atomic Ions* (Invited talk), J. Mur-Petit.

XX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Nuclear Energy (*EU congress*), Varna (Bulgaria), 16th-21st of September 2013.

- *Exactly Solvable Pairing Models in Nuclear and Mesoscopic Physics* (Invited talk), J. Dukelskly.
- *Symmetry Energy and Structure of Exotic Nuclei* (Invited talk), M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov, and E. Moya de Guerra.
- *Weak Decay Rates in Stellar Scenarios* (Invited talk), P. Sarriguren.

International Symposium on CO₂ Capture: Microscopic Studies and Applications (*EU congress*), Paris (France), 18th-20th of September 2013.

- *Interaction Potential Energy Surfaces of Imidazole+CO₂ systems* (Invited talk), M.Salah, K.Marakchi, H.Abou. El Makarim, O.K. Kabbaj, N.Komiha, Y. Ajili, P. Muthuramalingam, M.Hochla, M.L.Senent, and V.Timón (Together with the Molecular Physics Dept.).
- *Influence of the Functionalization of Imidazole on CO₂ uptake. A Theoretical Study* (Invited talk), M.Salah, Y. Ajili, K.Marakchi, N.Komiha, and M.L.Senent.
- *Single and Multiple Molecular CO₂ Adsorption Research in ZIF-1 and ZIF-8 Zeolitic* (Invited talk), V.Timón and M.L.Senent (Together with the Molecular Physics Dept.).

International Scientific Session in honour of the 70th Anniversary of Professor A.N. Antonov (*EU congress*), Sofia (Bulgaria), 23rd-24th of September 2013.

- *Neutron Skins in Spherical and Deformed Nuclei from Skyrme Hartree-Fock Calculations* (Invited talk), P. Sarriguren.
- *Nuclear Physics Probed with Dileptons* (Invited talk), E. Moya de Guerra.

Seventh Aegean Summer School - Beyond Einstein's Theory of Gravity (*International non-EU congress*), Parikia (Greece), 23rd-28th of September 2013.

- *Cosmology of Multiscale Spacetimes* (Oral contribution), G. Calcagni.

II Russian-Spanish Congress. Particle and Nuclear Physics at all scales, Astroparticle Physics and Cosmology (*International non-EU congress*), Saint Petersburg (Russia), 1st-4th of October 2013.

- *Symmetry Energy and Surface Properties of Neutron-Rich Exotic Nuclei* (Invited talk), M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.

Third International Satellite Conference on Mathematical Methods in Physics (*International non-EU congress*), Londrina (Brazil), 21st-26th of October 2013.

- *Combining Loop and Fock Quantization for Scalar fields in Cosmological Scenarios* (Invited talk), G.A. Mena Marugán.

- *A Unique Fock Quantization for Cosmological Universes with Perturbations* (Oral contribution), L. Castelló Gomar and G.A. Mena Marugán.

DFT: Applications et comparaisons aux autres méthodologies (*International non-EU congress*), Sousse (Tunisia), 26th-27th of October 2013.

- *Spectroscopic Characterization of Molecules: DFT vs ab Initio* (Invited talk), M.L.Senent.

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

16th International Symposium on Recent Advances in Drug Delivery Systems (*International non-EU congress*), Salt Lake City, (USA), 3rd-6th of February 2013.

- *Molecular Characterization of Drug Nanocarriers Based on Plasmon Enhanced Spectroscopies: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- *Noble Metal Nanoparticles Used as Carriers Systems for NSAIDs Drugs: SEF, Release and Binding* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández and J.V. García-Ramos, and C. Domingo.

5th European Conference on Applications of Femtosecond Lasers in Materials Science (FemtoMat 2013) (*EU congress*), Mauterndorf, Salzburg (Austria), 18th-20th of March 2013.

- *Assessment of Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Films* (Invited talk), E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, C. Domingo, T.A. Ezquerro, P. Moreno, and M. Castillejo.

4rd International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'13) (*International non-EU congress*), Sharjah (UAE), 18th-22nd of March 2013.

- *Exotic Optical Properties of Metallo-Dielectric Core-Shell Nanospheres and Nanowires. Application to Negative Refraction* (Invited talk), R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, F. López-Tejiera, L. Froufe-Pérez, and J.A. Sánchez-Gil.

IOP Nuclear Physics Group Conference (*International non-EU congress*), University of York (U.K.), 7th-10th of April 2013.

- *A Fast Phoswich Scintillator Array for Protons and Gamma Detection in Reactions at Relativistic Energies* (Oral contribution), J. Sánchez del Río Sáez.
- *Studying Neutron-Rich Nuclei beyond the Dripline* (Oral contribution), G. Ribeiro Jiménez.

XVIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica (*International non-EU congress*), Rosario (Argentina), 9th-12th of April 2013.

- *Estudio mediante espectroscopía SERS y UV-VIS de complejos cucurbit[8]uril - pesticidas (diquat y paraquat) adsorbidos sobre coloides de plata* (Poster), M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- *Caracterización molecular mediante SEF (Surface Enhanced Fluorescence) y SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) de sistemas nanotransportadores de los fármacos emodina, ketorolac e indometacina* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García Ramos, and C. Domingo.

Spie 2013: Optics + Optoelectronics (*EU congress*), Praga (Czech Republic), 13th-16th of April 2013.

- *Magneto-Optical Activity from Magnetic- and Electric- Dipolar Modes in Magnetoplasmonic Nanodisks* (Oral contribution), G. Armelles, A. Cebollada, F. García, A. García-Martín, M. Ujué González, D. Meneses, N. de Sousa, and L. Froufe-Pérez.

International Conference on Shape Coexistence Across the Chart of the Nuclides (*International non-EU congress*), York (U.K.), 15th-16th of April 2013.

- *Study of the Deformation of the N=Z Nucleus ⁷²Kr via its Beta Decay* (Oral contribution), J.A. Briz.

IMAGINENANO 2013-Workshop on Photonics, Plasmonics, Magneto-Optics (PPM 2013) (*International non-EU congress*), Bilbao (Spain), 23rd-26th of April 2013.

- *Detection of Alzheimer's Disease Markers by High Performance Plasmonic Silver Nanostars* (Invited talk) J.V. García-Ramos, A. García-Leis, and S. Sánchez-Cortés.
- *Wide-Band Transparent Metallo-Dielectric Nanowires at Telecommunications Wavelengths* (Oral contribution), L. Froufe-Pérez, R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, J.J. Sáenz, and J.A. Sánchez-Gil.
- *Noble Metal Nanoparticles Used as Carriers Systems for NSAIDs Drugs: SEF, Release and Binding* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- *Molecular Characterization of Drug Nanocarriers Based on Plasmon Enhanced Spectroscopies: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- *High Performance Nanosensors Based on Plasmonic Fano-Like Interference* (Oral contribution), F. López-Tejiera, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.

R3B Collaboration Meeting (*International non-EU congress*), Darmstadt (Germany), 14th-17th of May 2013.

- *s393 Unbound Nuclei: ¹³Be* (Oral contribution), G. Ribeiro Jiménez.

96th Canadian Chemistry Conference (*International non-EU congress*), Quebec (Canada), 26th-30th of May 2013.

- *SERS and SEF Nanosensors Based on Nanostructured Metal Surfaces: Strategies for Detection of Drugs and Biomolecules* (Invited talk), J.V. García-Ramos, E. Corda, C. Domingo, M. Hernández, P. Sevilla, A. García-Leis, and S. Sánchez-Cortés.

6th International Conference on Surface Plasmon Photonics (SPP6) (*International non-EU congress*), Ottawa (Canada), 26th-31st of May 2013.

- *Analysis of the Magneto-Optical Activity for the Magnetic- and Electric-Dipolar Modes in Magnetoplasmonic Nanodiscs* (Oral contribution), G. Armelles, A. Cebollada, F. García, A. García-Martín, M.U. González, D. Meneses-Rodríguez, N. da Sousa, and L. Froufe-Pérez.
- *Plasmonic Fano Resonances Become Single-Particle: High-Performance Refractive-Index Sensing on Colloidal Nanorice or Individual Nanobelts* (Oral contribution), F. López-Tejiera, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, and J.A. Sánchez-Gil.
- *Exotic Optical Properties of Metallo-Dielectric Core-Shell Nanospheres and Nanowires. Application to Negative Refraction* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, F. López-Tejiera, L. Froufe-Pérez, R. Marqués, and J.A. Sánchez-Gil.

European Material Research Society Spring Meeting (*EU congress*), Strasbourg (France), 28th-30th of May 2013.

- *Influence of Ag Nanoparticle Size and Configuration on the SERS Signal of Terphenyl Diisocyanide* (Poster), G. Baraldi, E. López-Tobar, S. Sánchez-Cortés, and J. Gonzalo.

International Nuclear Physics Conference (INPC 2013) (*International non-EU congress*), Florence (Italy), 2nd-7th of June 2013.

- *The ISOLDE Highlights and the HIE-ISOLDE Project* (Invited talk), M.J.G. Borge.
- *Scattering of Light Halo Nuclei on Heavy Target at Energies around the Coulomb Barrier* (Oral contribution), O. Tengblad.
- *Isomer and Beta-Decay Spectroscopy in the ¹³²Sn Region with EURICA* (Oral contribution), A. Jungclaus.
- *CEPA: A LaBr₃(Ce)/LaCl₃(Ce) Phoswich Array for Detection of Protons and Gamma Radiation* (Poster), J. Sánchez del Río Sáez.
- *Beta Decay Studies of the N=Z and Waiting Point Nucleus ⁷²Kr* (Poster), J.A. Briz.
- *Magnetic Moment Measurement in ⁷²Zn Using the Transient Field Technique and Coulomb Excitation in Inverse Kinematic* (Oral contribution+Poster), A. Illana.

VII National Congress of Food Science and Technology (*National congress*), Córdoba (Spain), 12th-14th of June 2013.

- *Application of Raman Spectroscopy in the Study of Polysaccharide Gels Used as Fillers of Olive Oil* (Oral contribution), A.M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, C. Navarro, P. Carmona, and F. Jiménez-Colmenero.

9th European-Biophysical-Societies-Association Congress (*EU congress*), Lisbon (Portugal), 13th of June 2013.

- *Detection of Amyloid Marker Thioflavin T on Ag Nanoparticles by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), G. Fabriciova, E. López-Tobar, M. Antalík, D. Jancura, M.V. Cañamares, A. García-Leis, D. Fedunova, and S. Sánchez-Cortés.

ENSAR, Town Meeting (*International non-EU congress*), Warsaw (Poland), 17th-20th of June 2013.

- *The PASPAG-SEE JRA project for Horizon2020* (Oral contribution), O. Tengblad.

- The 2013 International Conference on Applications of Nuclear Techniques** (*International non-EU congress*), Crete (Greece), 23rd-29th of June 2103.
- *CEPA: A LaBr₃(Ce)/LaCl₃(Ce) Phoswich Array for Detection of Protons and Gamma Radiation* (Oral contribution), J. Sánchez del Río Sáez.
- EURISOL User Group Topical Meeting 2013** (*International non-EU congress*), Krakow (Poland), 1st-3rd of July 2013.
- *Isomer and Beta-Decay Spectroscopy in the 132Sn Region: Present Status and Future Perspective* (Invited talk), A. Jungclaus.
- XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física y 23º Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física** (*National congress*), Valencia (Spain), 15th-19th of July 2013.
- *CEPA: A LaBr₃(Ce)/LaCl₃(Ce) Phoswich Array for Detection of Protons and Gamma Radiation* (Poster), J. Sánchez del Río Sáez.
 - *Shape Study of the N=Z and Waiting Point Nucleus ⁷²Kr via its Beta Decay* (Oral contribution), J.A. Briz.
 - *Beryllium beyond the Neutron Dripline: ¹³Be* (Poster), G. Ribeiro Jiménez.
- Exotic Beam Summer School 2013** (*International non-EU congress*), Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California (USA), 28th of July-4th of August 2013.
- *Beryllium beyond the Neutron Drip-Line: ¹³Be* (Oral contribution), G. Ribeiro Jiménez.
- ICoMST 59th International Congress of Meat Science and Technology** (*International non-EU congress*), Izmir (Turkey), 18th-23rd of August 2013.
- *Frankfurters Formulated with Oil Bulking Agents as Fat Replacers* (Poster), A.M. Herrero, P. Carmona, F. Jiménez-Colmenero, and C. Ruiz-Capillas.
- 15th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules** (*International non-EU congress*), Oxford (U.K.), 25th-30th of August 2013.
- *Fluorescence of Non-Steroidal Anti-Inflammatory Drugs Ketorolac and Indomethacin: Water Solution and Silver Colloid* (Poster), E. Corda, M. Hernández, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and P. Sevilla (Together with the Molecular Physics Dept.).
- SPIE (The International Society for Optical Engineering) Optics + Photonics 2013 Symposium on NanoScience + Engineering** (*International non-EU congress*), San Diego (USA), 25th-29th of August 2013.
- *Semiconductor Nanowire Photoluminescence: Enhanced and Directional Emission through Leaky/Guided Modes and Mie Resonances* (Oral contribution), R. Paniagua-Domínguez, G. Grzela, T. Barten, Y. Fontana, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
- 7th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS7)** (*International non-EU congress*), Kobe (Japan), 25th-30th of August 2013.
- *Raman Imaging of Mineral Deposited by Human Osteoblasts on Ceramic Composite Scaffolds* (Poster), J.V. García-Ramos, P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, L. Saldaña, N. Vilaboa, and C. Domingo.
 - *Adsorption and SERS Investigation of Somatostatin and Related Peptides on Plasmonic Metal Nanoparticles* (Poster), J.V. García-Ramos, B. Hernández, E. López-Tobar, Y.M. Coïc, J. Gómez, M. Ghomi, and S. Sánchez-Cortés.
 - *SERS and SEF study of Piroxicam in Silver and Gold Colloids* (Poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- 7th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA 2013)** (*International non-EU congress*), Ljubljana (Slovenia), 2nd-6th of September 2013.
- *TLC-SERS of Mauve, the First Synthetic Dye* (Oral contribution), M.V. Cañamares, D.A. Reagan, and M. Leona.
- Trends in Nanotechnology -TNT 2013**, (*International non-EU congress*), Sevilla (Spain), 9th-13th of September 2013
- *Magneto-Optical Activity in Interacting Magnetoplasmonic Nanodisks* (Oral contribution), G. Armelles, A. Cebollada, F. García, A. García-Martín, M. Ujué González, D. Meneses, N. de Sousa, and L. Froufe-Pérez.
- Sunflower- In-Beam Gamma-Ray Spectroscopy at the RIBF- Worksoop** (*International non-EU congress*), Darmstadt (Germany), 10th-11th of September 2013.
- *In-Beam Spectroscopy towards 100Sn and beyond 132Sn* (Invited talk), A. Jungclaus.

- 1st EOS Topical Meeting on Optics at the Nanoscale (ONS'13)** (*EU congress*), Capri (Italy), 12th-14th of September 2013.
- *Broadband Telecom Transparency of Semiconductor-Coated Metal Nanowires: More Transparent than Glass* (Oral contribution), L. Froufe-Pérez, R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, J.J. Sáenz, and J.A. Sánchez-Gil.
- EUROMAT 2013 – European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes** (*EU congress*), Sevilla (Spain), 8th-13th of September 2013.
- *Addition of Amorphous Nanosilica in C₃S Hydration* (Oral contribution), I.F. Saez del Bosque, S. Martínez-Ramírez, M. Martín-Pastor, and M.T. Blanco-Varela.
 - *Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymers* (Oral contribution), E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, C. Domingo, P. Moreno, and M. Castillejo.
- IUNS 20th International Congress of Nutrition** (*International non-EU congress*), Granada (Spain), 15th-20th of September 2013.
- *Oil Bulking Agents as Fat Replacers to Develop Healthier Meat Products: A Raman Spectroscopic Study* (Poster), C. Ruiz-Capillas, F. Jiménez-Colmenero, A.M. Herrero, and P. Carmona.
- METAMATERIALS'2013- The 7th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics** (*International non-EU congress*), Bordeaux (France), 16th-19th of September 2013.
- *Ultralow-Loss, Isotropic 2D Optical Negative-Index Metamaterials Based on Metal-Semiconductor Core-Shell Nanowires* (Oral contribution), R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, F. López-Tejera, L. Froufe-Pérez, R. Marqués, and J.A. Sánchez-Gil.
- 2nd International Workshop on Quasi-Free Scattering with Radioactive-Ion Beams** (*International non-EU congress*), Azores (Portugal), 16th-20th of September 2013.
- *CALIFA+CEPA Phopswich End-Cap for (p,2p) Reaction Detection* (Oral contribution), O. Tengblad.
- XX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications** (*International non-EU congress*), Varna (Bulgaria), 16th-22nd of September 2013.
- *Isomer and Beta-Decay Spectroscopy in the 132Sn Region: New Results from EURICA* (Invited talk), A. Jungclaus.
 - *New Isomeric States in Neutron-Rich Isotopes and the $\pi g_{9/2}^{-1} \otimes \nu h_{11/2}^{-1}$ Multiplet in ¹³⁰In* (Oral contribution), J. Taprogge.
- First CELIM Workshop - Fostering Excellence in Multiscale Cell Imaging** (*EU congress*), Strebske Pleso (Slovakia), 1st-3rd of October 2013.
- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy: from Nanofabrication to Application* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.
- 12th International Conference on Laser Ablation (COLA-2013)** (*International non-EU congress*), Ischia (Italy), 6th-11th of October 2013.
- *Time Evolution of the Infrared Laser Ablation Plasma Plume of Si* (Poster), L. Díaz, J.J. Camacho, J.P. Cid, and J.M.L. Poyato.
 - *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Nanostructured Polymer Films* (Poster), E. Rebollar, M. Hernández, M. Sanz, S. Pérez, M. Soccio, M. Martín, T.A. Ezquerro, C. Domingo, and M. Castillejo.
- SERS Round Table** (*EU congress*), Poltersdorf (Germany), 8th-11th of October 2013.
- *Strategies to Increase the Detection Power of Plasmonic Nanoparticles by SERS and SEF* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.
- 43rd WEFTA Conference** (*International non-EU congress*), Tromsø (Norway), 9th-11th of October 2013.
- *FTIR Spectral Changes of Lipids Extracted from Hake (Merluccius Merluccius, L.) Muscle Stored at Various Freezing Temperatures* (Oral contribution), I. Sánchez-Alonso, P. Carmona, and M. Careche.
 - *FTIR of the lipid fraction as a potential marker for monitoring the time and temperature history of frozen hake (Merluccius merluccius, L.) muscle* (Oral contribution), M. Careche, P. Carmona, J. Sánchez Valencia and I. Sánchez-Alonso.
- 12th International Conference on Nanoimprint & Nanoprint Technology** (*International non-EU congress*), Barcelona (Spain), 21st-23rd of October 2013.

- *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Polymer Films Nanostructured by Nanoimprint Lithography* (Poster), M. Soccio, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, C. Domingo, and T.A. Ezquerra (Together with the Molecular Physics and the Macromolecular Physics Depts.)

The Spring Workshop on GEANT4 simulations (*International non-EU congress*), Somerset West (South Africa), 28th October-2nd November 2013.

- *Scintillators Introduction* (Oral contribution), E. Nácher.
- *GEANT4 Applied to Solution of Practical Problem: The cases of TAS and PET* (Oral contribution), E. Nácher.

The 3rd International Conference on Cucurbituril (*International non-EU congress*), Canberra (Australia), 18th-20th of November 2013.

- *SERS and UV-Vis Spectroscopy of the Host-Guest Complexes of Viologen Pesticides (Diquat and Paraquat) with Cucurbit[8]uril* (Poster), C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and M.L. Roldán (Together with the Molecular Physics Dept.).
- *Host-Guest Complexes of Drugs Emodin, Piroxicam and Indomethacin with Cucurbiturils: UV-Visible, Fluorescence, 1H NMR and Raman Spectroscopic Study* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the Molecular Physics Dept.).

R3B Collaboration Meeting (*International non-EU congress*), Liverpool University (U.K.), 19th-21st of November 2013.

- *CEPA10 in CALIFA with Mechanical Structure for Gamma Radiation and Protons* (Oral contribution), J. Sánchez del Río Sáez.

Jornadas Internacionales de Investigación en Construcción, (*International non-EU congress*), Madrid (Spain), 21st-22nd of November 2013.

- *Caracterización de nuevos materiales cementantes* (Oral contribution), I.F. Sáez el Bosque, S. Martínez-Ramírez, M. Martín-Pastor, and M.T. Blanco-Varela.
- *Nuevos materiales de construcción basados en residuos* (Oral contribution), O. Rodríguez, M. Frías, I. Vegas, R. García, L. Vigil de la Villa, L. Fernández, and S. Martínez.

International Congress on Materials and Structural Stability (*International non-EU congress*), Rabat (Morocco), 27th-30th of November 2013.

- *Effect of the Addition of Nanosilica on White Cement Hydration at 25°C* (Oral contribution), I. Sáez del Bosque, S. Martínez-Ramírez, M. Martín-Pastor, and M.T. Blanco-Varela.
- *Validity of Water Industry Wastes in Cement Industry* (Invited talk), M.T. Blanco-Varela, N. Husillos Rodríguez, and S. Martínez-Ramírez.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

16th International Symposium on Recent Advances in Drug Delivery Systems (*International non-EU congress*), Salt Lake City, (USA), 3rd-6th of February 2013.

- *Noble Metal Nanoparticles Used as Carriers Systems for NSAIDs Drugs: SEF, Release and Binding* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dpt.).
- *Molecular Characterization of Drug Nanocarriers Based on Plasmon Enhanced Spectroscopies: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).

V Jornadas de jóvenes investigadores en física atómica y molecular (*National congress*), Madrid (Spain), 13th-15th of February 2013.

- *Procesos colisionales de H₂O + He en jets supersónicos por espectroscopia Raman* (Oral contribution), E. Moreno, G. Tejeda, J.M. Fernández, and S. Montero
- *Theoretical Study of the Reaction of S⁺ with Vibrationally Excited H₂* (Oral contribution) A. Zanchet.
- *A New Way to Enhance Sensitivity in Stimulated Raman Spectroscopy: Hollow-Core Photonic Crystal Fibers* (Oral contribution), M. Cueto and J.L. Doménech.
- *Platinum Nanoparticles Synthesized by Laser Ablation in Water and Their Use as Substrates for the Soft Laser Desorption/Ionization of Polymers and Peptides* (Poster), M. Cueto, F. Gámez, A.R. Hortal, P. Hurtado, B. Martínez-Haya, M. Sanz, M. Oujja, and M. Castillejo.

- *Energy Distributions of Neutrals and Ions in H₂ Low Temperature Plasmas* (Poster), M. Jiménez-Redondo.

5th European Conference on Applications of Femtosecond Lasers in Materials Science (FemtoMat 2013) (*EU congress*), Mauterndorf, Salzburg (Austria), 18th-20th of March 2013.

- *Assessment of Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Films* (Invited talk), E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, C. Domingo, T.A. Ezquerro, P. Moreno, and M. Castillejo (Together with the Macromolecular Physics Dept.).

European Geosciences Union General Assembly 2013 (*International non-EU congress*), Vienna (Austria), 7th-12th of April 2013.

- *Theoretical Investigation on Iodine Oxides Formation and Their Role in the Production of Atmospheric Aerosols* (Poster), O. Gálvez, P.C. Gómez, J.C. Gómez-Martín, A. Saiz-López, and L.F. Pacios.

XVIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica (*International non-EU congress*), Rosario (Argentina), 9th-12th of April 2013.

- *Estudio mediante espectroscopía SERS y UV-VIS de complejos cucurbit[8]uril - pesticidas (diquat y paraquat) adsorbidos sobre coloides de plata* (Poster), M.L. Roldán, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).
- *Caracterización molecular mediante SEF (Surface Enhanced Fluorescence) y SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) de sistemas nanotransportadores de los fármacos emodina, ketorolac e indometacina* (Oral contribution), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).

IMAGINE NANO 2013 (*International non-EU congress*), Bilbao (Spain), 23rd-26th of April 2013.

- *Noble Metal Nanoparticles Used as Carriers Systems for NSAIDs Drugs: SEF, Release and Binding* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).
- *Molecular Characterization of Drug Nanocarriers Based on Plasmon Enhanced Spectroscopies: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS)* (Poster), P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).

96th Canadian Chemistry Conference (*International non-EU congress*), Quebec (Canada), 26th-30th of May 2013.

- *SERS and SEF Nanosensors Based on Nanostructured Metal Surfaces: Strategies for Detection of Drugs and Biomolecules* (Invited talk) J.V. García-Ramos, E. Corda, C. Domingo, M. Hernández, P. Sevilla, A. García-Leis, and S. Sánchez-Cortés (Together with the ENVYMED Dept.).

Workshop: Processus physico-chimiques d'intérêt astrophysique: La chimie de l'azote (*National congress*), St. Florent (France), 3rd-6th of June 2013.

- *Les méthodes statistiques incluant les symétries de spin nucléaire* (Oral contribution), A. Zanchet.

XXV International Symposium on Molecular Beams (ISMB 2013) (*International non-EU congress*), Prague (Czech Republic), 9th-14th of June 2013.

- *Frustrated Solidification in Microjets of Undercooled Liquid Hydrogen Mixtures* (Poster), J.M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, R.E. Grisenti, and S. Montero.
- *Inelastic Collisions in H₂O+He Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Poster), G. Tejeda, E. Moreno, J.M. Fernández, and S. Montero.

Quantum Reactive Scattering 2013 (12th edition) (*International non-EU congress*), Bordeaux (France), 10th-14th of June 2013.

- *Dynamics of the Reaction of Mu with H₂ Molecules: Zero-Point Energy and Tunnelling* (Invited lecture), F.J. Aoiz, J. Aldegunde, P.G. Jambrina, V.J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, and E. García.

Workshop: Many-Dimensional Quantum Dynamics with (Non) Classical Trajectories (*EU congress*), Centre européen de calcul atomique et moléculaire (CECAM), Lausanne (Switzerland), 17th-21st of June 2013.

- *A Theoretical Study of the Reaction of Mu with H₂ Molecules. Effects of Zero-Point Energy, Tunneling and Vibrational Adiabaticity* (Invited talk), F.J. Aoiz, V.J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos.

The 68th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy (*International non-EU congress*), Columbus (USA), 17th-21st of June 2013.

- *Continuous-Wave Stimulated Raman Spectroscopy inside a Hollow-Core Photonic Crystal Fiber* (Oral contribution), J.L. Doménech and M. Cueto.

- *Detection of the Ammonium Ion in Space Supported by an Improved Determination of the 1_0-0_0 Rotational Frequency from the ν_4 Band of NH_3D^+* (Oral contribution), J.L. Doménech, M. Cueto, V.J. Herrero, I. Tanarro, J. Cernicharo, B. Tercero, A. Fuente, N. Marcelino, E. Roueff, M. Gérin, and J. Pearson.

III Encuentro sobre Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar (*National congress*), Madrid (Spain), 19th-21st of June 2013.

- *Diagnosis de plasmas de aire en laboratorio como banco de prueba para la obtención de la temperatura del gas en plasmas de aire generados por Eventos Luminosos Transitorios* (Oral contribution), F.J. Gordillo-Vázquez, F.C. Parra-Rojas, M. Passas, E. Carrasco, A. Luque, I. Tanarro, and M. Simek.
- *Constantes ópticas de hielos de NH_3 y $\text{NH}_3:\text{N}_2$ en IR medio y próximo* (Invited talk), B. Maté, A. Zanchet, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, M.A. Moreno, R. Escribano, and V.J. Herrero
- *Filosilicatos en el Sistema Solar: utilidad de su estudio computacional* (Poster), V. Timón.
- *Estudio de laboratorio sobre la formación del ión carbamato en hielos del Sistema Solar* (Invited talk), O. Gálvez, Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, V. Herrero, and R. Escribano.

Workshop: Dusty Plasmas and Cosmic Dust (Plasmas poussiéreux et poussières cosmiques) 3PC (*National congress*), Toulouse (France), 24th-25th of June 2013.

- *Plasma Kinetics and Spectroscopic Studies in Hollow Cathode Discharges of Mixtures of Hydrogen with Simple Molecules* (Invited talk), V.J. Herrero and I. Tanarro.

International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC 2013) (*EU congress*), Lille (France), 2nd-5th of July 2013.

- *Collisional Processes of $\text{H}_2\text{O}+\text{He}$ Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Oral contribution), E. Moreno, G. Tejada, J.M. Fernández, and S. Montero.

Dynamics of Molecular Collisions Conference 2013 (*International non-EU congress*), Granlibakken (CA, USA), 7th-12th of July 2013.

- *Inelastic Collisions in $\text{H}_2\text{O}+\text{He}$ Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Poster), S. Montero, G. Tejada, M.I. Hernández, E. Carmona, E. Moreno, and J.M. Fernández.

31 International Conference on Phenomena in Ionized Gases (*International non-EU congress*), Granada (Spain), 14th-19th of July 2013.

- *Ion-Molecule Reactions and Surface Kinetics in Cold Plasmas* (Plenary lecture), I. Tanarro, V.J. Herrero, and M. Jiménez-Redondo.
- *Chemistry in Glow Discharges of H_2/O_2 Mixtures. Diagnostics and Modelling* (Poster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V.J. Herrero, and I. Tanarro.

15th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules (*International non-EU congress*), Oxford (U.K.), 25th-30th of August 2013.

- *Fluorescence of Non-Steroidal Anti-Inflammatory Drugs Ketorolac and Indomethacin: Water Solution and Silver Colloid* (Poster), E. Corda, M. Hernández, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and P. Sevilla (Together with the ENVYMED Dept.).

The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy (*International non-EU congress*), Budapest (Hungary), 25th-30th of August 2013.

- *High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the $\nu_1\nu_5$, ν_2 and ν_3 bands of C_2H_4* (Poster), H. Aouididi, A. Ballandras, M. Cirtog, M. Rotger, D. Bermejo, R.Z. Martínez, J.L. Doménech, and V. Boudon.
- *Measurement of V-V Vibrational Relaxation Rates in Ortho-Para Collisions in N_2 at 77K by Double Resonance Stimulated Raman Spectroscopy* (Poster), D. Bermejo and R.Z. Martínez.

7th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS7) (*International non-EU congress*), Kobe (Japan), 25th-30th of August 2013.

- *Raman Imaging of Mineral Deposited by Human Osteoblasts on Ceramic Composite Scaffolds* (Poster), J.V. García-Ramos, P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, L. Saldaña, N. Vilaboa, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).
- *SERS and SEF Study of Piroxicam in Silver and Gold Colloids* (Poster), P. Sevilla, M. Hernandez, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).

- International Conference on Research and Applications of Plasmas, PLASMA 2013** (*International non-EU congress*), Warsaw (Poland) 2nd-6th of September 2013.
- *Main Kinetic Mechanisms in Cold Plasmas of H₂-Rich Mixtures with Simple Molecules* (Invited talk), I. Tanarro, V.J. Herrero, and M. Jiménez-Redondo.
- European Planetary Science Congress 2013** (*EU congress*), London (U.K.), 8th-13th of September 2013.
- *Spectroscopic Diagnosis of Laboratory Air Plasmas as a Benchmark for Spectral Diagnosis of TLEs* (Oral contribution), F.C. Parra-Rojas, M. Passas, E. Carrasco, A. Luque, I. Tanarro, M. Simek, and F.J. Gordillo-Vázquez.
- EUROMAT 2013** (*EU congress*), Sevilla (Spain), 8th-13th of September 2013.
- *Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymers* (Oral contribution), E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, C. Domingo, P. Moreno, and M. Castillejo (Together with the ENVYMED and Macromolecular Physics Depts.).
- XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics, IBER 2013** (*EU congress*), Sevilla (Spain), 9th-11th of September 2013.
- *Dynamics of the Reactions of Deuterium Atoms with MuH Molecules* (Poster), V Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, J. Aldegunde, and V.J. Herrero.
 - *Energy Distributions of Neutrals and Ions in H₂ Low Temperature Plasmas: A Study of Fast H Atoms* (Poster), M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero, and I. Tanarro.
 - *Optical Constants of NH₃ and NH₃:N₂ Amorphous Ices in the MIR and NIR Regions* (Poster), A. Zanchet, Y. Rodríguez-Lazcano, Ó Gálvez, V.J. Herrero, R. Escribano, and B. Maté.
 - *High Resolution Vibration-Rotation Spectroscopy with Two Lasers: Infrared and Raman Experiments* (Invited lecture), J.L. Doménech and M. Cueto.
 - *Crystallization in Undercooled Liquid Microjets of H₂/D₂ Mixtures* (Oral contribution), J.M. Fernández, M. Kühnel, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, R. E. Grisenti, and S. Montero.
 - *Inelastic Collisions in O₂+He Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Poster), F. Gámez, E. Moreno, G. Tejeda, M. Bartolomei, M. I. Hernández, J. Campos-Martínez, J.M. Fernández, and S. Montero.
 - *Simulation of the Raman Spectrum of CO₂ through an Algebraic Approach* (Poster), M. Sánchez-Castellanos, R. Lemus, M. Carvajal, F. Pérez-Bernal, and J.M. Fernández.
 - *Inelastic Collisions in H₂O+He Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Poster), G. Tejeda, E. Moreno, E. Carmona-Novillo, M. I. Hernández, J.M. Fernández, and S. Montero.
- International Symposium on CO₂ Capture: Microscopic Studies and Applications 2013** (*EU congress*), Paris (France), 17th-19th of September 2013.
- *Interaction Potential Energy Surfaces of Imidazole+CO₂ Systems* (Invited talk), M.Salah, K.Marakchi, H.Abou. El Makarim, O.K. Kabbaj, N.Komiha, Y. Ajili, P. Muthuramalingam, M.Hochla, M.L.Senent, and V.Timón (Together with the QFT Dept.).
 - *Single and Multiple Molecular CO₂ Adsorption Research in ZIF-1 and ZIF-4 Zeolitic Imidazolate Frameworks* (Oral contribution), V. Timón and M.L. Senent (Together with the QFT Dept.).
- 12th International Conference on Laser Ablation (COLA 2013)** (*International non-EU congress*), Ischia (Italy), 6th-11th of October 2013.
- *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Nanostructured Polymer Films* (Poster), E. Rebollar, M. Hernández, M. Sanz, S. Pérez, M. Soccio, M. Martín, T.A. Ezquerra, C. Domingo, and M. Castillejo (Together with the Macromolecular Physics Dept.).
- 12th International Conference on Nanoimprint & Nanoprint Technology** (*International non-EU congress*), Barcelona, (Spain), 21st-23rd of October 2013.
- *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Polymer Films Nanostructured by Nanoimprint Lithography* (Poster), M. Soccio, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, C. Domingo, and T.A. Ezquerra (Together with the ENVYMED and Macromolecular Physics Depts.)
- The 3rd International Conference on Cucurbituril** (*International non-EU congress*), Canberra (Australia), 18th-20th of November 2013.
- *SERS and UV-Vis Spectroscopy of the Host-Guest Complexes of Viologen Pesticides (Diquat and Paraquat) with Cucurbit[8]uril* (Poster), C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and M.L. Roldán (Together with the ENVYMED Dept.).

- *Host-Guest Complexes of Drugs Emodin, Piroxicam and Indomethacin with Cucurbiturils: UV-Visible, Fluorescence, ¹H NMR and Raman Spectroscopic Study* (Poster), P. Sevilla, E. Corda, M. Hernández, J.V. García-Ramos, and C. Domingo (Together with the ENVYMED Dept.).

Energy and Environment Knowledge Week (E2KW 2013) (*International non-EU congress*), Toledo (Spain), 20th-22nd of November 2013.

- *Atmospheric Degradation of HFE-7500: Gas-Phase Reactivity Study towards OH Radicals as a Function of the Temperature* (Poster), A. Rodríguez, D. Rodríguez, A. Moraleda, I. Bravo, E. Moreno, Y. Díaz-de-Mera, A. Notario, and A. Aranda.

AGU Fall Meeting (*International non-EU congress*), San Francisco (USA), 9th-13th of December 2013.

- *Crystallization of Amorphous CO₂ Ice at Astronomical Conditions* (Oral contribution), G. Muñoz Caro, G.A. Cruz-Díaz, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, and R. Escribano.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

European XFEL and DESY Photon Science Users' Meeting 2013 (*International non-EU congress*), Hamburg (Germany), 23rd-25th of January 2013.

- *SAXS Studies of Nanolayered Polymer Composites: Influence of Confinement* (Oral contribution), F.J. Baltá Calleja, A. Flores, and F. Ania.

5th European Conference on Applications of Femtosecond Lasers in Materials Science (FemtoMat 2013) (*EU congress*), Mauterndorf, Salzburg (Austria), 18th-20th of March 2013.

- *Assessment of Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Films* (Invited talk), E. Rebolgar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, C. Domingo, T.A. Ezquerro, P. Moreno, and M. Castillejo (Together with the Molecular Physics Dept.).

5th International Conference on Hybrid and Organic Photovoltaics (HOPV13) (*International non-EU congress*), Sevilla (Spain), 5th-8th of May 2013.

- *Order and Chain Alignment in 1D Nanopillars of Conjugated Polymers* (Poster), M.C. García-Gutiérrez, A. Sanz, M. Soccio, T.A. Ezquerro, and J.J. Hernández.

Third International Symposium Frontiers in Polymer Science 2013 (*International non-EU congress*), Sitges (Spain), 21st-23rd of May 2013

- *Influence of Different Nanocomposite Formulations on the Morphology and Surface Mechanical Properties of Starch Based Polymers* (Poster), C. Fonseca, C. Hubert, E. Biasutti, F. Ania, A. Flores, and A. Ochoa.

Young Researchers in Polymer Science JIP 2013 (*National congress*), Cala Galdana, Menorca (Spain), 26th-30th of May 2013.

- *Improving Information Density in Ferroelectric Polymer Films by Using Nanoimprinted Gratings* (Oral contribution), D. Martínez-Tong, M. Soccio, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, N. Alayo, F. Pérez-Murano, and T.A. Ezquerro.
- *Crystallization under One-Dimensional Confinement in Alumina Nanopores of Poly (Trimethylene Terephthalate) and its Composites with Single Wall Carbon Nanotubes* (Oral presentation), I. Martín-Fabiani, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, A. Linares, J.J. Hernández, T.A. Ezquerro, and M. Reynolds.
- *Microfocus X-RAY Analysis of Semicrystalline Polymer Nanorods* (Oral contribution), I. Martín-Fabiani, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, A. Linares, J.J. Hernández, T.A. Ezquerro, and M. Reynolds.

European Polymer Congress EPF-2013 (*International non-EU congress*), Pisa (Italy), 16th-21st of June 2013.

- *Chain Arrangement and Glass Transition Temperature Variations in Polymer Nanoparticles under 3D-Confinement* (Oral contribution), D.E. Martínez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, C. García, T.A. Ezquerro, and A. Nogales
- *Consequences of the Smectic-Isotropic Transition on the Formation of P3HT Nanotubes and Nanowires* (Oral contribution), J. Martín, A. Nogales, and M. Martín Gonzalez.

Gaussian Workshop: Introduction to Gaussian: Theory and Practice (*EU congress*), Wroclaw (Poland), 24th-28th of June 2013.

- *Systematic Conformational Modeling of Zirconocene Catalysts to Provide Accurate Data for 3D Quantitative Structure-Activity Relationship Models* (Poster), S. Martínez, V.L. Cruz, J. Ramos, and J. Martínez-Salazar.

International Discussion Meeting on Polymer Crystallization 2013 (*International non-EU congress*), Kyoto (Japan), 30th of June-4th of July 2013.

- *Confined Crystallization of Polymers in Nanolayered Compacting Structures* (Oral), F.J. Baltá Calleja, F. Ania, and A. Flores.

29th International Conference of the Polymer Processing Society (*International non-EU congress*), Nuremberg (Germany), 15th-19th of July 2013.

- *Impact of Nanoscale Confinement on Coextruded Polymer Nanocomposites* (Oral contribution), F.J. Baltá Calleja.

7th International Discussion Meeting of Relaxation in Complex Systems (*International non-EU congress*), Barcelona (Spain), 21st-26th of July 2013.

- *Relaxation in Semicrystalline Polymers: A Case of Homogeneous Dynamics within an Inhomogeneous Environment* (Invited talk), T. Ezquerro, A. Nogales, A. Sanz, M. Soccio, and A. Linares.
- *Dynamics of Density fluctuations in Lower Order-Disorder Transition Diblock Copolymers by X Ray Photon Correlation Spectroscopy* (Oral contribution), A. Nogales, A. Sanz, and T.A. Ezquerro.
- *Phase Transitions in Supercooled Alcohols Studied by Simultaneous Dielectric Spectroscopy and Neutron Diffraction* (Invited talk), A. Sanz, A. Nogales, T. Ezquerro, M. Jiménez, and I. Puente.
- *Crystallization of PLLA Confined in Ultrathin Films, Competition of Finite Size Effects and Irreversible Chain Adsorption* (Oral contribution), D. Martínez-Tong, B. Vanroy, B. Chattopadhyay, and Y. Geerts.
- *Chain Arrangement and Glass Transition Temperature Variations in Polymer Nanoparticles under 3D-Confinement* (Poster), D. Martínez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, C. García, T. Ezquerro, and A. Nogales.

Anticancerdrugs 2013 (*EU congress*), Stockholm (Sweden), 22nd-23rd of August 2013.

- *Interaction between Trastuzumab and ErbB2 Analyzed by Molecular Dynamics Simulation* (Oral contribution), V.L. Cruz, J.F. Franco-González, J. Ramos, and J. Martínez-Salazar.

ALBA User Meeting 2013, VI AUSE Conference and Satellite Workshop on Biomedical Applications of Synchrotron Radiation (*EU congress*), Barcelona (Spain), 3rd-6th of September 2013.

- *Order and Chain Alignment in 1D Nanopillars of Conjugated Polymers Studied by X-Ray Microdiffraction* (Poster), M.C. García-Gutiérrez, A. Sanz, M. Soccio, T.A. Ezquerro, J.J. Hernández, and I. Puente Orench.
- *Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering (GISAXS) as a Tool for Characterization and Optimization of Polymer Nanostructures* (Oral contribution). I. Martín-Fabiani, E. Rebollar, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, M. Castillejo, and T.A. Ezquerro.

Les Journées d'Etudes des Matériaux Polymères JEMP2013 (*International non-EU congress*), Béjaia (Algeria), 2nd-3rd of October 2013.

- *Micromechanics of Polymer Surfaces: Non-Destructive Characterización of Biomaterials* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja.

12th International Conference on Laser Ablation (COLA 2013) (*International non-EU congress*), Ischia (Italy), 6th-11th of October 2013.

- *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Nanostructured Polymer Films* (Póster) E. Rebollar, M. Hernández, M. Sanz, S. Pérez, M. Soccio, M. Martín, T.A. Ezquerro, C. Domingo, and M. Castillejo (Together with the Molecular Physics Dept.).

12th International Conference on Nanoimprint & Nanoprint Technology (NNT) 2013 (*International non-EU congress*), Barcelona (Spain) 21st-23rd of October 2013.

- *Assessment of Replica Quality in Polymer Gratings Fabricated by Nanoimprint Lithography by means of Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering* (Poster), M. Soccio, T.A. Ezquerro, M.C. García Gutiérrez, D.R. Rueda, E. Rebollar, N. Alayo, and F. Pérez-Murano.
- *Analysis of SERS Substrates Based on Gold Coated Polymer Films Nanostructured by Nanoimprint Lithograph* (Poster), M. Soccio, N. Alayo, E. Rebollar, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, C. Domingo, M. Castillejo, F. Pérez-Murano, and T.A. Ezquerro (Together with the ENVYMED and Molecular Physics Depts.).
- *Improving Control on Information Storage in Ferroelectric Polymer Films by using Nanoimprint Lithography* (Poster), D.E. Martínez Tong, M. Soccio, T.A. Ezquerro, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, A. Nogales, N. Alayo, and F. Pérez-Murano.

VIII Edición de Jornadas REDIMadrid, 21 de Noviembre 2013 (*Regional congress*), Madrid (Spain), 21st of November 2013.

- *Tecnología GRID para explorar los elementos estructurales de las proteínas* (Oral contribution), V.L. Cruz.

4.2 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Prof. N. Sandulescu**, National Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Romania, January 2013 and December 2013.
- ❖ **Dr. Francois Lique**, University of Le Havre, France, 18th-22nd of February 2013.
- ❖ **Dr. Fabien Dumouchel**, University of Le Havre, France, 18th-22nd of February 2013.
- ❖ **Prof. Anton Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 16th-30th of April 2013.
- ❖ **Dr. Mitko Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 16th-30th of April 2013.
- ❖ **Prof. M. Hochlaf**, University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 16th-18th of April 2013.
- ❖ **Dr. Ireneusz Bulik**, Rice University, USA, 7th-14th May 2013.
- ❖ **Dr. Ioannis Klefogiannis**, University of Ioannina, Greece, 3rd-15th of June 2013.
- ❖ **Dr. Elias Amanatidis**, University of Ioannina, Greece, 3rd-15th of June of 2013.
- ❖ **Prof. Najia Komija**, Universidad Mohammed V, Rabat, Morocco, 16th-21st of June 2013.
- ❖ **Dr. Oum Keltoum Kabbaj**, Universidad Mohammed V, Rabat, Morocco, 16th-21st of June 2013.
- ❖ **Dr. Khadija Marrakchi**, Universidad Mohammed V, Rabat, Morocco, 16th-21st of June 2013.
- ❖ **Dr. Hassna Abou El Makarim**, Universidad Mohammed V, Rabat, Morocco, 16th-21st of June 2013.
- ❖ **Prof. Gerardo Ortiz**, Indiana University, USA, 17th-23rd of June 2013.
- ❖ **Prof. Leonardo Modesto**, Fudan University, Shanghai, China, 23rd-29th of June 2013.
- ❖ **Prof. Shinji Tsujikawa**, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan, 23rd-29th of June 2013; 9th-22nd of September 2013.
- ❖ **Prof. Paulo Moniz**, Universidade da Beira Interior, Portugal, 24th-27th of June 2013.
- ❖ **Prof. José M. Velinho**, Universidade da Beira Interior, Portugal, 24th-26th of June 2013.
- ❖ **Dr. Javier Olmedo**, Universidad de la República, Uruguay, 29th of June- 13rd of July 2013.
- ❖ **Dr. R. Rodríguez-Guzmán**, Rice University, Houston (Texas), USA, 5th-19th of July 2013.
- ❖ **Prof. Gustavo Scuseria**, Rice University, USA, 22nd-28th of July 2013.
- ❖ **Dr. Sachiko Kuroyanagi**, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan, 9th-14th of September 2013.
- ❖ **Mrs. Rahma Boussesti**, University Tunis el Manar, Tunisia, 1st-30th of December 2013.

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

- ❖ **D. Leonardo Furini**, “Estatat Paulista” University, Presidente Prudente, Brazil, 1st of February-30st of November 2013.
- ❖ **D^a Johanna Gómez**, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia, 1st of February-1st of May 2013.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, “Paris XIII” University, Paris, France, 22nd of April-4th of May, 11th-18th of November, 25th of November-1st of December 2013.
- ❖ **Prof. Ornella Francioso**, Agrarian Faculty, Bologna University, Italy, 3rd-9th of June 2013.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, “Paris XIII” University, Paris, France, 25th of November-1st of December 2013.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 25th of November-1st of December 2013.
- ❖ **Dr. Gabriela Fabriciova**, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 25th of November-1st of December 2013.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 4th-7th of December 2013.

4.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **José Luis Piza Betancourt**, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Mexico, 21st of May – 21st of July 2013.

4.3 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Prof. L. Modesto.

Fudan University (China).
Finite Quantum Gravity and M-Theory.
16th of January 2013.

Prof. M. P. Dabrowski.

University of Szczecin (Poland).
Cosmic Singularities and Varying Constants Cosmologies.
14th of February 2013.

Prof. N. Sandulescu.

National Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest (Romania).
Neutron Star Cooling and Nuclear Superfluidity.
26th of March 2013.

International Loop Quantum Gravity Seminars:

(By phone conference, together with 13 other international institutions)

Dr. E. Bianchi.

Perimeter Institute for Theoretical Physics (Canada).
Entanglement in Loop Quantum Gravity.
29th of January 2013.

Dr. H. Haggard.

Centre de Physique Théorique, National Center for Scientific Research (France).
Dinamical Chaos and the Volume Gap.
12th of February 2013.

Prof. S. Alexander.

Dartmouth College, Hanover (USA).
Gravity Electroweak Unification.
26th of February 2013.

Drs. E. Alesci and F. Cianfrani.

Warsaw University (Poland) and University of Wroclaw (Poland).
Quantum Reduced Loop Gravity.
12th of March 2013.

Brajesh Gupt.

Louisiana State University, Baton Rouge (USA).
Bianchi I Loop Quantum Cosmology.
26th of March 2013.

Wolfgang Wieland.

Centre de Physique Théorique, National Center for Scientific Research (France).
Hamiltonian Spinfoam Gravity.

9th of April 2013.

Prof. Martin Bojowald.

Penn State University (USA).
A Loop Quantum Multiverse?
23rd of April 2013.

Dr. Yasha Neiman.

Penn State University (USA).
The Imaginary Part of the GR Action and the Large-Spin 4-Simplex Amplitude.
7th of May 2013.

Dr. Norbert Bodendorfer.

Penn State University (USA).
Black Hole Entropy from LQG: Higher Dimensions and Generalized Theories.
1st of October 2013.

Dr. Derek Wise.

Friedrich-Alexander-Universität (Germany).
Holographic Special Relativity: Observer Space from Conformal Geometry.
15th of October 2013.

Dr. Asieh Karami.

Universidad Nacional Autónoma de México (Mexico).
Bianchi IX LQC: Quantization Ambiguity and Effective Description.
29th of October 2013.

Dr. Tim Koslowski.

University of New Brunswick (Canada).
Bianchi IX LQC: What Can We Learn from Shape Dynamics?
13th of November 2013.

Dr. Saeed Rastgoo.

Universidad Nacional Autónoma de México (Mexico).
Towards the Resolution of the CGHS Singularity in LQG.
10th of December 2013.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dr. Elizabeth Escamilla Roa

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Granada (Spain).
Adsorción de glicina en la superficie del grano cometario. Efecto del amoníaco en el modelo de hielo sucio.
21st of January 2013.

Dr. Javier Fochesatto

University of Alaska, Fairbanks (USA).
Laser Remote Sensing of the Atmosphere.
12th of April 2013.

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

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

Jorge Dukelsky

- University of Stockholm, Sweden, 6th-16th of January 2013.

- Department of Chemistry, Rice University (Texas), USA, 19th-31st of January 2013 and 9th of October-6th of November 2013.

Eduardo Garrido Bellido

- Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Pisa, Italy, 3rd-11th of January 2013.

Guillermo A. Mena Marugán.

- Perimeter Institute, Waterloo, Canada, 21st-31st of July 2013.
- Leung Center for Cosmology and Particle Astrophysics, NTU, Taipei, Taiwan, 8th-16th of October 2013.
- Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Brazil, 21st-31st of October 2013.
- Tokyo University of Science, Japan, 3rd-9th of December 2013.

María Luisa Senent Diez.

- Universidad Mohammed V, Rabat, Morocco, 28th of February-26th of March 2013.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- Humboldt University, Berlin, Germany, 26th of August-6th of September 2013.

Gianluca Calcagni.

- University of Rome La Sapienza, Italy, 16th-23th of February 2013.
- Fudan University, Shanghai, China, 25th of May-1st of June 2013.
- Tokyo University of Science, Japan, 2nd-8th of June 2013.
- Parikia and University of Athens, Greece, 22nd of September-3rd of October 2013.
- Tokyo University of Science, Japan, 17th of November-3rd of December 2013.

Jordi Mur Petit

- Kavli Institute for Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara (CA), USA, 22nd of January-28th of March 2013.

Daniel Huerga Gómez

- Laboratoire de Physique Theorique, Université Paul Sabatier, Toulouse, France, 10th of October-11th of December 2013.

Mikel Fernández Méndez.

- Fudan University, Shanghai, China, 19th of November-2nd of December 2013.

Óscar Moreno Díaz

- Center for Theoretical Physics and Laboratory for Nuclear Science, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (MA), USA, January-December 2013.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- Université Paris 13, Paris, France, 19th-25th of February, 19th-25th of November 2013.
- University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 16th-23th of June.
- Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 1st of July-10th of September 2013.

Francisco Javier Bermejo.

- ISIS, STFC Rutherford Appleton Laboratory, Harwell Oxford, U.K., 26th of September-17th of December 2013.

José Vicente García Ramos

- Université Paris 13, Paris, France, 19th-25th of November 2013.

Olof Tengblad.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 6th-31st of May 2013.
- ISOLDE, CERN, Geneve, Switzerland, 1st July-30th of December 2013.

Carlos Cabrillo.

- Institute Lau Langevin, Grenoble, France 9th - 25th of April 2013.

M^a Vega Cañamares Arribas

- Université Paris 13, Paris, France, 19th- 25th of November 2013.

Ricardo Fernández Perea.

- ISIS, STFC Rutherford Appleton Laboratory, Harwell Oxford, U.K., 25th of February-25th of March 2013.

José Sánchez del Río Sáez.

- Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland (IFJ PAN), 10th-18th of March 2013.

José Antonio Briz Monago.

- ISOLDE, Geneve, Switzerland, 24th of October – 20th of December 2013.

Vicente Pesudo.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 6th-31st of May 2013.

Jan Taprogge.

- RIKEN, Nishina Center, Wako-shi, Japan, 1st - 26th of May 2013.

Mariano Carmona Gallardo.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 16th of March - 16th of June 2013.

Adianez García Leis.

- University Pavol Jozef Safarik of Kosice, Slovak Republic, 16th of June-16th of August 2013.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland (IFJ PAN), 20th March-1st April 2013.
- University of Aarhus, Denmark, 4th of September - 12th of November 2013.

Ángel Perea Martínez.

- Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poland. (IFJ PAN), March 2013.
- TRIUMF, Vancouver, Canada, 6th-31st of May 2013.
- ISOLDE, CERN, Geneve, Switzerland, July and September 2013.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Miguel Jiménez Redondo.

- Eindhoven University of Technology, Eindhoven, The Netherlands, 15th of September-15th of November 2013.

4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Juan Felipe Franco González

- Biomolecular Science and Biotechnology Institute, University of Groningen, Groningen, The Netherlands, 1st June- 1st August 2013.

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

Jorge Dukelsky

- Integrable Richardson-Gaudin Models in Mesoscopic Physics – International School on Exact and Numerical Models of Low-Dimensional Quantum Structures, Intitute of Theoretical and Applied Physics, Turunc, Turkey.
4th-12th of August 2013, 8 hours.

Jesús Fernando Barbero González

- Métodos asintóticos, Valencia University.
12th-14th of February 2013, 4 hours.

Luis J. Garay.

- Relatividad general avanzada y agujeros negros – Máster en Física Fundamental – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
1st of February-1st of June 2013 – 23 hours.
- Geometría diferencial y cálculo tensorial – Grado en Física – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
1st of February-1st of June 2013 – 45 hours.

Elvira Moya Valgañón.

- Física Nuclear y de Partículas. Quinto curso de Licenciatura en Ciencias Físicas – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
January 2013, 10 hours.
- Física Nuclear. Cuarto curso del Grado en Física – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
January 2013, 10 hours.
- Física Medioambiental. Cuarto curso del Grado en Física – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
18th - 25th of April 2013, 10 hours.
- Energía Nuclear. Máster de Energía – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
29th of September 2013 - 25th of January 2014, 35 hours.
- Física Nuclear y de Partículas. Quinto curso de Licenciatura en Ciencias Físicas – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
29th of September 2013 - 25th of January 2014, 15 hours.

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

Sagrario Martínez Ramírez.

- Química del Cemento – CSIC Postgraduate Course – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
6th-15th of February – 3 hours.
- La Conservación de los Geomateriales utilizados en el Patrimonio (3^a Edition) – CSIC Postgraduate Course- National Non-official – Universidad Complutense de Madrid.
8th-15th April – 2 hours.

Enrique Nácher González.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Máster Interuniversitario de Física Nuclear – National Official – Universidad de Sevilla.
21st-25th January –25 hours.
- Física Nuclear Experimental – Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics” – International – Universidad Carlos III de Madrid.
Fechas de docencia –10 hours.
- Geant4 for low-energy applications – PhD Course – Non-Official – iThemba Labs, South Africa.
28th October-2nd November –3+10 hours.

José Antonio Briz Monago.

- Física Nuclear Experimental – Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics” – International – Universidad Carlos III de Madrid.
4th, 11th and 17th of April –12 hours.

Olof Tengblad.

- Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials –Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics” – International– Universidad Carlos III de Madrid.
March-April –10 hours Laboratory Project-CSIC.
- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Máster Interuniversitario de Física Nuclear – National Official – Universidad de Sevilla.
February –2 hours.

Mariano Carmona.

- Curso de Instrumentación Nuclear – Maestría en Física Médica – International – Universidad Nacional de Costa Rica.
Fechas de docencia –12 hours.

Vicente Pesudo Fortes.

- Física Nuclear Experimental – Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics” – International – Universidad Carlos III de Madrid.
13th-17th of May–10 hours.

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto.

- Espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas (Surface Enhanced Raman Scattering, SERS).Aplicaciones a sistemas biológicos – Espectroscopía vibracional y cristalografía aplicadas a sistemas biológicos- Máster – National Official (Argentina) – Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán.
25th-27th of March – 10 horas.
- Aplicación de la espectroscopía Raman al estudio de superficies - Caracterización químico física de la superficie de los sólidos – Postgrado - Grupo Especializado de Adsorción (RSEF y RSEQ) y CSIC, Jarandilla de la Vera.
11th-14th of June – 2 horas.

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz

- Introduction to the application of X-Ray diffraction analysis in materials science. West Pomeranian University of Technology, Institute of Materials Science and Engineering, Szczecin, Poland.
12th-13nd of December 2013 - 4 hours.

Juan Francisco Vega Borrego

- Reología - Alta Especialización en Plásticos y Cauchos - Máster - National Official - Universidad Internacional Menéndez Pelayo (CSIC).
1st of March 2013 - 2 hours.

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS / COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS

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

Jorge Dukelsky

- *Introduction to Exactly Solvable Richardson-Gaudin Models I*, Rice University, Houston (USA), 10th of October 2013.
- *Introduction to Exactly Solvable Richardson-Gaudin Models II*, Rice University, Houston (USA), 17th of October 2013.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Relatividad: la Física del Espacio y del Tiempo*, Centro de Formación Interdisciplinaria Superior (CFIS), Universidad Politécnica de Cataluña, 30th of April 2013.
- *Geometric Constraint Algorithm for Field Theories with Boundaries: A Different Hamiltonian Point of View*, Centre de Physique Théorique de Luminy, Marseille (France), 15th of October 2013.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology*, Leung Center for Cosmology and Astrophysics, National Taiwan University, Taipei (Taiwan), 11th of October 2013.
- *Combining Loop and fock Quantizations for Cosmological Perturbations*, Tokyo University of Science (Japan), 6th of December 2013.

Gianluca Calcagni.

- *Field Theory on Multifractal Spacetimes*, University of Turin (Italy), 12th of February 2013.
- *Field Theory on Multifractal Spacetimes*, University of Rome La Sapienza (Italy), 21st of February 2013.
- *Probing the Quantum Nature of Spacetime by Diffusion*, Asymptotic Safety Seminar, 13th of May 2013.
- *Introduction to Multiscale Spacetimes*, Tokyo University of Science (Japan), 7th of June 2013.
- *Cosmology of Multiscale Spacetimes*, Tokyo University of Science (Japan), 29th of November 2013.

Mathias Lunde

- *A Two-Dimensional Topological Insulator Coupled to a Spin-Bath*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 14th of March 2013.

Jordi Mur Petit

- *Cold Molecules for Quantum Information and Vice Versa: From Molecular Spectroscopy to a Molecular Qubit*, Dept. Chemistry & Georgia Tech Quantum Institute, Atlanta, Georgia (USA), 19th of February 2013.
- *(Ultra)Cold Molecules: A New Playground for Physicists and Chemists*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 5th of March 2013.
- *Quantum Information Technologies: 3 Easy Pieces*, Dept. Physics, University of Oxford, Oxford (U.K.), 13th of September 2013.
- *(Ultra)Cold Molecules: A New Playground for Physicists, Chemists, and Materials Scientists*, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, 28th of November 2013.

Mikel Fernández Méndez.

- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology*, Fudan University, Shanghai (China), 25th of November 2013.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- *Raman and Surface-Enhanced Optical Spectroscopy*, Summer School on Biophotonics, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 21st June 2013.
- *Metal Nanoparticles: Spectroscopic and Catalytical Properties*, Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 19th July 2013.
- *Plasmonic Nanoparticles and Surface-Enhanced Optical Spectroscopy: From Nanofabrication to Applications*, National Institute of Materials Science, Tsukuba, Japan, 2nd of September 2013.
- *Plasmonic Nanoparticles and Surface-Enhanced Optical Spectroscopy: From Nanofabrication to Applications*, Université de Technologie de Troyes, Troyes, France, 20th of November 2013.

M^a José García Borge.

- *Explorando el paisaje nuclear*, Facultad de Ciencias Físicas, Salamanca, 11th of March 2013.

Carlos Cabrillo García.

- *The Unique Quantum Character of Solid Para-Hydrogen*, Institute Lau Langevin, Grenoble, France, 11th of April 2013.
- *La física de la materia desordenada*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.

Pedro Carmona Hernández

- *Aplicaciones biológicas de la espectroscopía vibracional*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Química de los conglomerantes hidráulicos*, Facultad de Químicas de la Universidad de Alcalá de Henares, Madrid, 11th of April 2013.

Adianez García Leis.

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.

Ramón Paniagua Domínguez.

- *Nanofotónica y metamateriales en el IEM*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto

- *Surface-enhanced molecular spectroscopies: SERS (Raman scattering), SEIRA (infrared absorption) and SEF (fluorescence emission)*, Photon Science Division, HASYLAB (DESY), Hamburg (Germany), 15th of February 2013.
- *Espectroscopía Raman: de estudios intracelulares a misiones planetarias pasando por los nanotubos de carbono y el patrimonio cultural*, Universidad Nacional de Tucumán, Tucumán (Argentina), 26th of March 2013.
- *Espectroscopía SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) de pigmentos orgánicos naturales y sintéticos de interés en el Patrimonio Cultural*, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (Argentina), 4th of April 2013.
- *Estrategias para la detección y caracterización molecular de contaminantes medioambientales sobre superficies metálicas nanoestructuradas (SERS)*, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (Argentina), 5th of April 2013.
- *Espectroscopía Raman: de estudios intracelulares a misiones planetarias pasando por los nanotubos de carbono y el patrimonio cultural*, Dpto. Química Física, Universidad de Málaga, 5th of July 2013.

José M^a Fernández Sánchez.

- *Microchorros fluidos fuera del equilibrio*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.
- *Microchorros de hidrógeno líquido subenfriado. Experimentos mediante Espectroscopía Raman*, Facultad de Químicas de la Universidad Complutense, Madrid, 28th of June 2013.

Belén Maté Naya

- *Hielos y plasmas de interés atmosférico y astrofísico*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”. Madrid, 20th of March 2013.

Raúl Martínez Torres

- *Espectroscopía láser de alta resolución en moléculas ligeras*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March 2013.

Juan Ortigoso Martínez

- *Control cuántico molecular*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of March.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Javier Martínez de Salazar y Juan Francisco Vega Borrego

- *Biophysical Aspects of Diverse Biomacromolecular Systems: VLPs, EGFR and Glycoprotein 140 of VIH*, Sino Biological, Ltd., Beijing (China), 2nd of December 2013.

Mari Cruz García Gutiérrez

- *Fabricación de nanoestructuras poliméricas: caracterización y propiedades*, Jornada: “Nanomecánica y Nanomateriales”, Universidad Rey Juan Carlos, Madrid, 17th of April 2013.

Juan Francisco Vega Borrego

- *Caracterización de macromoléculas (polímeros, biopolímeros y proteínas) por cromatografía de permeación en gel (GPC/SEC) y tiple detección TDAmx*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 26th of November 2013.
- *Examples of Protein Characterization Using Light Scattering and GPC/SEC Technique*, in *Protein Meeting: Characterization of Proteins by Means of Light Scattering and SEC-LS Technique*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 27th of November 2013.

Francisco Javier Ramos Díaz

- *Simulación multiescalar de sistemas macromoleculares de interés biológico y sintético*, part of the “X Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, 21st of March 2013.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

José González Carmona

- Member of the Advisory Committee of the Conference *Nanoscience and Nanotechnology 2013*, Laboratori Nazionali di Frascati, Frascati (Italy), 30th of September 2013 to 4th of October 2013.

Jesús Fernando Barbero González

- Member of the Scientific Committee of the *XXII International Fall Workshop on Geometry and Physics*, Évora (Portugal), 2nd-5th of September 2013.

Guillermo Antonio Mena Marugán

- Member of the Scientific Committee of the conference *Loops 13*, Perimeter Institute, Waterloo (Canada), 22nd-26th of July 2013.

- Member of the Organizing Committee of the workshop *1st i-Link Workshop Macro-from-Micro: Quantum Gravity and Cosmology* (Spain).

María Luisa Senent Díez

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *International symposium on CO2 capture: microscopic studies and applications*, Paris (France).

Rafael Alejandro Molina Fenández

- Member of the Jury Committee of the SINIF 2013 Research Prize.

Gianluca Calcagni

- Member of the Organizing Committee of the workshop *1st i-Link Workshop Macro-from-Micro: Quantum Gravity and Cosmology* (Spain).
- Organizer of the *X Curso de Introducción a la Investigación del Instituto de Estructura de la Materia*, IEM-CSIC, Madrid, 20th -22nd of March 2013.

Jordi Mur-Petit

- Member of the Organizing Committee of the *IV Encuentro Gases Cuánticos en Madrid* (Madrid, Spain), 14th of January 2013.
- Review Editor for *Frontiers in Physical Chemistry and Chemical Physics*.

Mikel Fernández Méndez

- Member of the Organizing Committee of the workshop *1st i-Link Workshop Macro-from-Micro: Quantum Gravity and Cosmology* (Spain).

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

M^a José García Borge

- Chair of the Editorial Board of the journal *Nuclear Physics News* (2011-2014).
- Member of the Experts Committee *Programme Advisory Committee* (PAC) of the Laboratori Nazionali del Sud (Catania, Italy) since 2009.
- Member of the Scientific Council *GANIL/SPIRAL2* (France) since 2013.
- Member of the International Advisory Committee of the *International Nuclear Physics Conference 2013* in Florence (Italy), 2nd-7th of June.
- Member of *International Advisory Committee of the Ecole Joliot-Curie*, 2012-2013.

Carlos Cabrillo García

- Member of Facility Evaluation Panel on *Disordered Matter (FAP2)* of the ISIS Pulsed Neutron & Muon Source.

José A. Sánchez Gil

- Member of the Scientific Reviewing Panel of the *7th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS 2013)*, Bordeaux (France).
- Outstanding Reviewer 2013 of the *Optical Society of America (OSA)*.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza

- Member of the International Advisory Committee of the *International Conference on Spectral Line Shapes*.
- Member of the International Steering Committee of the *European Conference on Non-linear Optics (ECONOS)*.
- Member of the International Advisory Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.

- Adjunct Profesor in the Department of Physics and Astronomy at the *University of Lethbridge*, Lethbridge, Canada.

Concepción Domingo Maroto

- Socio de Honor (Sociedad Española de Óptica, SEDOPTICA).

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 Atómica y Molecular (GEFAM)* of the *Real Sociedad Española de Física (RSEF)* (Spain).
- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*.
- Member of the Local Organizing Committee of the *International Conference on Processes of Ionized Gases, ICPIG 2013*.

Salvador Montero Martín

- Member of the Editorial Board of the *Journal of Raman Spectroscopy*, Wiley (U.K.).

José Luis Doménech Martínez

- Member of the International Advisory Committee of the (formerly OSU) *International Symposium on Molecular Spectroscopy* (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 Local Organizing Committee of the *International Conference on Processes of Ionized Gases, ICPIG 2013*.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG)*. Period 2012-2016.

Belén Maté Naya

- President of the *Comité de Espectroscopía* of the *Sociedad Española de Optica- SEDOPTICA* (Spain).

Timón Salinero Vicente

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

Óscar Gálvez González

- Organizer of the *X Curso de Introducción a la Investigación del Instituto de Estructura de la Materia*, IEM-CSIC, Madrid, 20th -22nd of March 2013.

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz

- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana

- Member of *Trusties of Board of Agencia Estatal CSIC*, Ministerio de Ciencia e Innovación, since March 2008.
- Member of the *Committee: Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, since March 1996.
- Member of the *Editorial Board* of the journal “*e-Polymer*”.
- *Assistant Editor* of the journal “*e-Polymer*”.

Aurora Nogales Ruiz

- Member of the *Facility Acces Pannel* of the Rutherford Appleton Laboratory (ISIS), Oxfordshire, U.K.

Araceli Flores Aguilar-Amat

- Member of the Scientific Committee of the *POLYCHAR World Forum*.

Mari Cruz García Gutiérrez

- President of the Executive Board of the *Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE)*, since September 2013 (<http://auseweb.wordpress.com/junta-de-gobierno/>).
- Secretary of the Executive Board of the *Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE)*, July 2007-September 2013 (<http://auseweb.wordpress.com/junta-de-gobierno/>).
- Spanish delegate of the *European Synchrotron Users Organization (ESUO)*, since January 2010 (<http://www.esuo.org/?node=delegatesAndObservers>).
- Member of Editorial Board of the journal "*ISRN Nanomaterials*" since March 2012.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the ALBA User Meeting 2013 and VI AUSE Conference, Barcelona (Spain).

Juan Francisco Vega Borrego

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

Francisco J. Baltá Calleja

- *Honorary Member* of the *Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Board of the Society for International Studies (SEI)*, Madrid.
- *Honorary Member* of the *Akademie Mitteldeutsche Kunststoffinnovationen*, Merseburg, Germany.
- Member of the *Royal Academy of Sciences*, Barcelona.
- Member of *Editorial Board* of the *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*.

Ignacio Martín-Fabiani

- Best Communication Award at the conference *Young Researchers in Polymer Science JIP 2013*, Cala Galdana, Menorca (Spain), 26th – 30th of May 2013.

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

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

José González Carmona

Outreach talk: *Nanociencia del carbono: fullerenos, nanotubos, grafeno*.

XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

13th of November 2013.

Jesús Fernando Barbero González

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.

I.E.S. Luis de Góngora (Torrejón de Ardoz, Madrid).

4th of February 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.

I.E.S. Las Rozas 1 (Las Rozas, Madrid).

5th of February 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.

I.E.S. Juan de Herrera (San Lorenzo del Escorial, Madrid).

7th of February 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
I.E.S. José Luis López Aranguren (Fuenlabrada, Madrid).
19th of March 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
I.E.S. Miguel Delibes (Torrejón de la Calzada, Madrid).
20th of March 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
I.E.S. Renacimiento (Madrid).
12th of April 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
I.E.S. San Mateo (Madrid).
18th of April 2013.

Outreach talk: *¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)*.
I.E.S. Velázquez (Móstoles, Madrid).
23rd of April 2013.

Outreach talk: *Agujeros Negros y Física Contemporánea*.
Colegio Mayor Chaminade (Madrid).
27th of May 2013.

Outreach talk: *Amazing Materials*.
Kings College (Tres Cantos, Madrid).
6th of November 2013.

Outreach talk: *¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)*.
XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
8th of November 2013.

Outreach talk: *Relatividad: la física del espacio y del tiempo*.
XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
15th of November 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
Colegio Nazaret Oporto (Madrid).
18th of November 2013.

Outreach talk: *Materiales Asombrosos*.
I.E.S. Villarejo (Villarejo de Salvanes, Madrid).
19th of December 2013.

Rafael Alejandro Molina Fernández

Outreach talk: *Caos: Un nuevo paradigma científico*.
Academic Day organized by Ayuntamiento de Guadarrama, Madrid.
12th of June 2013.

Outreach talk: *Caos: Un nuevo paradigma científico*.
XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
15th of November 2013.

Jordi Mur Petit

Outreach talk: *¿De qué va la ciencia? De The Big Bang Theory al ordenador cuántico*.
Cultural Week 2013, FECYT & IES Príncipe Felipe, Madrid.
23rd of April 2013.

Outreach talk: *Relatividad sin ecuaciones*
Academic Day organized by Ayuntamiento de Guadarrama, Madrid.
12th of June 2013.

Física 2012.
Book chapter, in "Anuari 2012" by Enciclopèdia Catalana, S.A., Barcelona, 2013.
ISBN: 978-84-412-2251-9. Depósito legal: B-1966-2013.

Gianluca Calcagni, Luis J. Garay and Mikel Fernández Méndez

Grupo de Teatro científico TeatrIEM.
Theater play: *Todo x la ciencia*.
XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales,
Madrid.
15th (morning and afternoon), 16th and 17th of November 2013.

Theater play: *Todo x la ciencia*.
V Jornadas de Teatro Científico Divulgativo, Sala Trajano, Mérida.
5th of December 2013.

Luis J. Garay

Outreach talk: *Relatividad y leyes físicas*.
La Uni en la calle. Patio de Maravillas, Madrid.
9th of March 2013.

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

José Vicente García Ramos

Grupo TeatrIEM.
Director and Actor in "Todo x la Ciencia: Siete conversaciones ideadas, posibles e irreales y un monólogo que nunca ha sido". (Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos).
XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales,
Madrid.
15th (morning, for primary school students, and afternoon), 16th and 17th of November 2013.

Theater play: *Todo x la ciencia*.
V Jornadas de Teatro Científico Divulgativo, Sala Trajano, Mérida.
5th of December 2013.

Santiago Sánchez Cortés

Program "4^ºESO+Empresa". Comunidad de Madrid
Short stay of students at the laboratories of "Espectroscopia y Preparación de Muestras", Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid.
18th-21st of March 2013.

Visit to the laboratories of "Espectroscopia y Preparación de Muestras".

X Curso de Introducción a la Investigación del Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid.
20th of March 2013.

Sagrario Martínez Ramírez

Workshop: *Mis primeros pasos en la Investigación.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Colegio Arquitecto Gaudí, Madrid.

5th of November 2013.

Workshop: *Mis primeros pasos en la Investigación.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Colegio Ramón y Cajal, Madrid.

11th of November 2013.

Workshop: *Mis primeros pasos en la Investigación.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Colegio Lourdes, Madrid.

12th of November 2013.

Workshop: *Mis primeros pasos en la Investigación.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Colegio María Virgen, Madrid.

15th of November 2013.

Workshop: *Mis primeros pasos en la Investigación.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), C.P. Ramiro de Maeztu, Madrid.

19th- 21st of November 2013.

Program “4^oESO+Empresa”. Comunidad de Madrid

Short stay of students at the laboratories of “Espectroscopía y Preparación de Muestras”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

18th-21st of March 2013.

Enrique Nácher González

Outreach talk: *Viaje al interior de la Materia.*

Organized by CPAN, I.E.S. Infanta Elena (Galapagar, Madrid).

9th of May 2013.

José Sánchez del Río Sáez.

Outreach talk: *Detectores de Radiación y centelleo. Simulaciones Momtecarlo.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

14th of November 2013.

Vicente Pseudo Fortes

Outreach talk: *Viaje al interior del Núcleo.*

XIII Semana de la Ciencia, organized by Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

16th of November 2013.

Mariano Carmona Gallardo

Outreach talk: *Viaje al interior de la Materia.*

Organized by CPAN, I.E.S. Isaac Albéniz, (Leganés, Madrid).

19th of December 2013.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M^a Fernández Sánchez

Program “4^oESO+Empresa”. Comunidad de Madrid

Short stay of students at the Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

18th-21st of March 2013.

José M^a Fernández Sánchez, Guzmán Tejeda Gala and Elena Moreno Atahonero

Outreach talk and guided visit: *El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular*

Students of 2^o Bachillerato of Colegio Arturo Soria de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

15th of March 2013.

Óscar Gálvez González

Outreach talk: *Hielo en el Universo: de la Tierra al Medio Interestelar*.

XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

8th of November 2013.

Outreach talk: *¿Qué es la química cuántica y para qué sirve?*

XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

13th of November 2013.

Grupo de Teatro científico TeatrIEM.

Theater play: *Todo x la ciencia*.

XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales, Madrid.

15th (morning and afternoon), 16th and 17th of November 2013.

Theater play: *Todo x la ciencia*.

V Jornadas de Teatro Científico Divulgativo, Sala Trajano, Mérida.

5th of December 2013.

Isabel Tanarro Onrubia.

Outreach talk: *Plasma, el cuarto estado de la materia*".

Students of 2^o Bachillerato of Colegio Arturo Soria de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

15th of March 2013.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz, Mari Cruz García Gutiérrez and Michela Soccio

Grupo de Teatro científico TeatrIEM.

Theater play: *Todo x la ciencia*.

XIII Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales, Madrid.

15th (morning and afternoon), 16th and 17th of November 2013.

Theater play: *Todo x la ciencia*.

V Jornadas de Teatro Científico Divulgativo, Sala Trajano, Mérida.

5th of December 2013.

Aurora Nogales Ruiz

Program "4^oESO+Empresa". Comunidad de Madrid

Short stay of students at the laboratories of the Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid.

18th-21st of March 2013.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

Incorporación al Comité Científico de Empresa.

Researcher: Santiago Sánchez-Cortés

Collaboration: SAS Regulaxis

Place: Paris, France.

Dates: October 2013

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH THE INDUSTRIAL COMPANIES

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

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

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: July 2010-March 2013.

Reuniones de transferencia de tecnología:

Meeting attendees: Tiberio Ezquerro Sanz, Francisco Ramos (FAE).

Collaboration: **FAE S.A.**

Place: IEM-CSIC, Madrid.

Date: 9th of September 2013.

Meeting attendees: Javier Martínez de Salazar, Juan Francisco Vega y Francisco Javier Morín Hernández (Normon).

Collaboration: **Laboratorios Normon S.A.**

Place: Tres Cantos (Madrid).

Date: November, 2013.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Informes de transferencia tecnológica:

Tiberio Ezquerro Sanz

Study: Crosslinking of polymer-carbon fiber composites

FAE S.A. Madrid 2013.

Javier Ramos Díaz

Study: Evaluation of structure and entanglements in short chain branched polyolefin melts by Monte Carlo codes.

Mitsui Chemicals, Japan (2013).

Rafael Núñez Ramírez, Juan Francisco Vega Borrego, and Javier Martínez-Salazar

Study: Size Exclusion Chromatography by Tertradetection of Hyaluronic Acid.

Laboratorios Rubió, Barcelona (2013).

5.6 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

- Associated Unit between IEM, CSIC (Responsible: Pedro Sarriguren Suquilbide) and the Nuclear Physics Group of the Department of Atomic, Molecular and Nuclear Physics, Universidad Complutense de Madrid, (Responsible: E. Moya de Guerra), renewed for the period 2011-2013.

- Associated Unit between IEM, CSIC (Responsible: Jorge Dukelsky) and the Nuclear Physics Group of the Department of Atomic, Molecular and Nuclear Physics, Universidad de Sevilla, (Responsible: José Miguel Arias), renewed for the period 2012-2014.
- Associated Unit between IEM, CSIC (Responsible: Jesús Fernando Barbero González) and the Instituto Gregorio Millán, Grupo de Modelización y Simulación Numérica, (Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor), period 2012-2014.

Otras actividades / Other activities:

Jesús Fernando Barbero González.

- Panel member for the PhD thesis “Sur les Propriétés Thermodynamiques et Quantiques des Trous Noirs” by Ernesto Frodden, Université D’Aix-Marseille, Faculté des Sciences, Ecole Doctorale Physique et Sciences de la Matière. Centre Physique Théorique de Luminy, 15th of October 2013.

María Luisa Senent Díez. Short stays:

- Universidad Túnez El Manar, Tunisia, 1st-6th of April and 23rd-28th of October 2013.
- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 20th-24th of May and 16th-21st of September 2013.

Gianluca Calcagni.

- Panel member for the PhD dissertation of the thesis “Cosmología cuántica inhomogénea: teoría cuántica de campos y gravedad de lazos” by D. Martín de Blas, U. Complutense de Madrid, 17th of September 2013.
- National Scientific Qualification as “Professore di seconda fascia” [Associate Professor] (n. 16584) in sector 02/A2 “Fisica teorica delle interazioni fondamentali” [Theoretical physics of fundamental interactions] of the Ministry of Education and Research, Italy, 28th of November 2013.
- National Scientific Qualification as “Professore di prima fascia” [Full Professor] (n. 16578) in sector 02/A2 “Fisica teorica delle interazioni fondamentali” [Theoretical physics of fundamental interactions] of the Ministry of Education and Research, Italy, 28th of November 2013.

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

- Associated Unit between IEM, CSIC (Responsible: Santiago Sánchez Cortés) and the Group of “Spectroscopy and Molecular Structure” (Department of Physical Chemistry) from the Universidad de Málaga (Responsible: Juan Carlos Otero).

Otras actividades / Other activities:

Santiago Sánchez Cortés.

- Short stay at the University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 3rd- 7th of October 2013.

Sagrario Martínez Ramírez.

- CTN80 Standardization Technical Committee: STN02/CTN-80 Subcommittee. Chemical Properties, Madrid, September 2013.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

- “Molecular Physical Chemistry”, between IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC (Responsible: Víctor J. Herrero) and Dpto. Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (Responsible: F. Javier Aoiz), renewed for 2012-2015.

Otras actividades / Other activities:

Dionisio Bermejo Plaza.

- Groupe de recherche international (GDRI), HiResMIR (High Resolution Microwave), Infrared and Raman molecular spectroscopy for atmospheric, planetologic and astrophysical applications.
- Collision relaxation rates (conference), HiResMIR@CAES-Frejus-2013, Frejus (France), 3rd-7th of June.

Concepción Domingo Maroto.

- Spanish Representative in the COST Action MP1102: “Coherent Raman Microscopy (microCoR)” (Program “Materials, Physical and Nanosciences”, MPNS).

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 sites, from 2005 on.

Raúl Martínez Torres.

- Collision relaxation rates (conference), HiResMIR@CAES-Frejus-2013, Frejus (France), 3rd-7th of June.

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities:

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 7th-11th of March 2013.
- Attendance to the meeting of the “Scientific Council” del “Institute Laue-Langevin (ILL)”, Grenoble, France, 20th-22th of March 2013.
- Measurements in the POLUX beamline of the Swiss Synchrotron (SLS), Villigen, Switzerland, 2nd-8th of October 2013.
- Visit to the laboratory of organic chemistry (Dr. Luis Oriol) Faculty of Science and member of the PhD thesis tribunal, University of Zaragoza, Zaragoza, Spain, 23rd-27th of October 2013.
- Attendance to the meeting of the “Scientific Council” del “Institute Laue-Langevin (ILL)”. Grenoble, France, 6th-8th of November 2013.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 20th- 25th of November 2013.

Aurora Nogales Ruiz.

- **Facility Access Panel Meeting** (*EU congress*), Rutherford Appleton Laboratory, Oxford (U.K), 5th-6th of June 2013 (Participation).
- **Facility Access Panel Meeting** (*EU congress*), Rutherford Appleton Laboratory, Oxford (U.K), 11th-13th of December 2013 (Participation).
- Short stay: Measurements at the P10 beamline of the Synchrotron PETRA III, Hamburg, Germany, 29th of July, 2nd of August 2013.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) (beamline BM26), Grenoble, France, 20th- 25th of November 2013.

Fernando Ania García.

- Member of a Board of Examiners of Doctoral Thesis, School of Agricultural Engineering, Universidad Politécnica de Madrid, 22nd November 2013.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stays:

- One beamtime allocation at the ESRF (BM29), Grenoble, France, 9th-11th of April 2013.
- Member of a Board of Examiners of Doctoral Thesis, Universidad Complutense de Madrid, November 2013.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) (beamline ID02), Grenoble, France, 7th-12th of March 2013.
- Member of PhD tribunal, Universidad de Sevilla, Sevilla, Spain, 14th of June 2013.

- Measurements in the línea P10 beamline of the PETRA III synchrotron , Hamburg, Germany, 31th of July, 4th of August 2013.
- Measurements in the POLUX beamline of the Swiss Synchrotron (SLS), Villigen, Switzerland, 2nd-8th of October 2013.
- Attendance to the meeting of the “Scientific Advisory Committee” of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 10- 12th of November 2013.

Juan Francisco Vega Borrego

- Collaboration Meeting at Sino Biological, Ltd. Labs, Beijing (China), 29th of November-4th of December 2013.

Francisco Javier Ramos Díaz

- Attendande to Multi-scale modeling from First Principles 2013 (Internaltional Congress), Girona, 8th-13th of September 2013.

Alejandro Sanz Parras. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) (beamline ID02), Grenoble, France, 7th-11th of March 2013.
- Measurements at the BL04 beamline of the ALBA Synchrotron, Barcelona, Spain, 27th- 29th of November 2013.

Michelina Soccio. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) (beamline ID02), Grenoble, France, 7th-11th of March 2013.
- Measurements in the POLUX beamline of the Swiss Synchrotron (SLS), Switzerland, 2nd-8th of October 2013.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato. Short stays:

- Universidad de Surrey, Surrey, U.K., 24th-25th of October 2013.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) (beamline BM26), Grenoble, France, 20th- 25th of November 2013.

Álvaro Rodríguez Rodríguez. Short stays:

- Measurements in the POLUX beamline of the Swiss Synchrotron (SLS), Villigen, Switzerland, 2nd-8th of October 2013.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 20th- 25th of November 2013.

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 2 scientific publications in 2013, accumulating a total of 11 publications in the past three 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. Al-Mogren, M.L. Senent, and M. Hochlaf.
Theoretical Characterization of C_7 , C_7^- , and C_7^+ .
J. Chem. Phys. **139**, 064301 (2013).
2. R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, F. Simkovic, and A. Faessler.
Testing the Single-State Dominance Hypothesis.
AIP Conference Proceedings **1572**, 3 (2013).
3. M. Arzano and G. Calcagni.
Black-Hole Entropy and Minimal Diffusion.
Physical Review D **88**, 084017 (2013).
4. L. Austen, L. Cook, M. D. Lee, and J. Mur-Petit.
Many-Body Dynamics of p-Wave Feshbach Molecule Production: A Mean-Field Approach.
Physical Review A **87**, 023610 (2013).
5. J.F. Barbero, J. Prieto and E.J.S. Villaseñor.
Band Structure in the Polymer Quantization of the Harmonic Oscillator.
Classical and Quantum Gravity **30**, 165011 (2013).
6. M. Bouhmadi-López, P. Chen, Y.-C. Huang, and Y.-H Lin.
Slow-Roll Inflation Preceded by a Topological Defect Phase à la Chaplygin Gas.
Physical Review D **87**, 103513 (2013).
7. M. Bouhmadi-López, J. Morais, and A.B. Henriques.
Smoking Guns of a Bounce in Modified Theories of Gravity through the Spectrum of Gravitational Waves.
Physical Review D **87**, 103528 (2013).
8. M. Bouhmadi-López and Y. Tavakoli.
Why is the Running Vacuum Energy more Benign than the Holographic Ricci Dark Energy?
Physical Review D **87**, 023515 (2013).
9. G. Calcagni.
Diffusion in Multiscale Spacetimes.
Physical Review E **87**, 012123 (2013).
10. G. Calcagni.
Observational Effects from Quantum Cosmology.
Annalen der Physik **525**, 323 (2013).
11. G. Calcagni.
Multi-Fractional Spacetimes, Asymptotic Safety and Horava-Lifshitz Gravity.
International Journal of Modern Physics A **28**, 1350092 (2013).
12. G. Calcagni.
Relativistic Particle in Multiscale Spacetimes.
Physical Review D **88**, 065005 (2013).
13. G. Calcagni.
Multi-Scale Gravity and Cosmology.
Journal of Cosmology & Astroparticle Physics **1312**, 041 (2013).

14. G. Calcagni, A. Eichhorn, and F. Saueressig.
Probing the Quantum Nature of Spacetime by Diffusion.
Physical Review D **87**, 124028 (2013).
15. G. Calcagni and G. Nardelli.
Symmetries and Propagator in Multifractal Scalar Field Theory.
Physical Review D **87**, 085008 (2013).
16. G. Calcagni and G. Nardelli.
Spectral Dimension and Diffusion in Multiscale Spacetimes.
Physical Review D **88**, 124025 (2013).
17. G. Calcagni, D. Oriti, and J. Thürigen.
Laplacians on Discrete and Quantum Geometries.
Classical & Quantum Gravity **30**, 125006 (2013).
18. G. Calcagni, L. Papantonopoulos, G. Siopsis, and N. Tsamis.
Preface.
Lecture Notes in Physics **863** (2013).
19. J. Cortez, D. Martín-de Blas, G.A. Mena Marugán, and J. M. Velhinho.
Massless Scalar Field in de Sitter Spacetime: Unitary Quantum Time Evolution.
Classical & Quantum Gravity **30**, 075015 (2013).
20. J. Cortez, L. Fonseca, D. Martín-de Blas, and G.A. Mena Marugán.
Uniqueness of the Fock Quantization of Scalar Fields under Mode Preserving Canonical Transformations Varying in Time.
Physical Review D **87**, 044013 (2013).
21. M. Fernández-Méndez, G.A. Mena Marugán, and J. Olmedo.
Hybrid Quantization of an Inflationary Model: The Flat Case.
Physical Review D **88**, 044013 (2013).
22. E. Garrido, A.S. Jensen, and D. V. Fedorov.
Rotational Bands in the Continuum Illustrated by ^8Be Results.
Physical Review C **88**, 024001 (2013).
23. E. Garrido, M. Gattobigio and A. Kievsky.
Recombination Rates from Potential Models close to the Unitary Limit.
Physical Review A **88**, 032701 (2013).
24. J. González.
Dynamical Breakdown of Parity and Time-Reversal Invariance in the Many-Body Theory of Graphene.
Journal of High Energy Physics **07**, 175 (2013).
25. J. González.
Magnetic and Kohn-Luttinger Instabilities near a Van Hove Singularity: Monolayer versus Twisted Bilayer Graphene.
Physical Review B **88**, 125434 (2013).
26. M. Hernández Vera, F. Lique, F. Dumouchel, J. Klos, J. Rubayo Soneira, and M.L. Senent.
Cyanides/Isocyanides Abundances in the Interstellar Medium - II: Inelastic Rate Coefficients of Al and Mg Compounds.
Mon. Not. R. Astron. Soc. **432**, 468 (2013).
27. Y. Huang, K. Chen, Y. Deng, J.L. Jacobsen, R. Kotecký, J. Salas, A.D. Sokal, and J.M. Swart.
Two-Dimensional Potts Antiferromagnets with a Phase Transition at Arbitrarily Large q .
Physical Review E **87**, 012136 (2013).
28. Y. Huang, Y. Deng, J.L. Jacobsen, and J. Salas.
The Hintermann-Merlini-Baxter-Wu and the Infinite-Coupling-Limit Ashkin-Teller Models.

- Nuclear Physics B **868**, 492 (2013).
29. D. Hueriga, J. Dukelsky, and G. E. Scuseria.
Composite Boson Mapping for Lattice Boson Systems.
Physical Review Letters **111**, 045701 (2013).
 30. J.L. Jacobsen and J. Salas.
A Generalized Beraha Conjecture for Non-Planar Graphs.
Nuclear Physics B **875**, 678 (2013).
 31. J.L. Jacobsen and J. Salas.
Is the Five-Flow Conjecture Almost False?
Journal of Combinatorial Theory B **103**, 532 (2013).
 32. S. Lerma H. and J. Dukelsky.
The Lipkin–Meshkov–Glick Model as a Particular Limit of the $SU(1, 1)$ Richardson–Gaudin Integrable Models.
Nuclear Physics B **870**, 421 (2013).
 33. T. Löfwander, P. San-Jose, and E. Prada.
Quantum Hall effect in Graphene with Twisted Bilayer Stripe Defects.
Physical Review B **87**, 205429 (2013).
 34. A.M. Lunde and G. Platero.
Hyperfine Interactions in Two-Dimensional HgTe Topological Insulators.
Physical Review B **88**, 115411 (2013).
 35. G.A. Mena Marugán, D. Martín-de Blas, and L. Castelló Gomar.
Unitary Evolution and Uniqueness of the Fock Quantization in Flat Cosmologies.
Journal of Physics Conference Series **410**, 012151 (2013).
 36. R.A. Molina, P. Schmitteckert, D. Weinmann, R.A. Jalabert, and Ph. Jacquod.
Mesoscopic Behavior of the Transmission Phase through Confined Correlated Electronic Systems.
Physical Review B **88**, 045419 (2013).
 37. O. Moreno, E. Navarro de Martino, E. Moya de Guerra, and P. Sarriguren.
Nuclear Structure Aspects of Atomic Parity Violation in Barium.
Romanian Journal of Physics **58**, 1270 (2013).
 38. G. Ortiz, Z. Nussinov, J. Dukelsky, and A. Seidel.
Repulsive Interactions in Quantum Hall Systems as a Pairing Problem.
Physical Review B **88**, 165303 (2013).
 39. P. Sarriguren.
Stellar Electron-Capture Rates in pf -Shell Nuclei from Quasiparticle Random Phase Approximation Calculations.
Physical Review C **87**, 045801 (2013).
 40. P. Sarriguren, O. Moreno and E. Moya de Guerra.
Gamow-Teller Strength Distributions in the Double-Beta Decay Partners $^{128,130}\text{Te}$ and $^{128,130}\text{Xe}$.
Romanian Journal of Physics **58**, 1242 (2013).
 41. M.L. Senent and M. Hochlaf.
Reactivity of Anions in Interstellar Media: Detectability and Applications.
Astrophys. J. **768**, 59 (2013).
 42. M.L. Senent, R. Dominguez-Gómez, M. Carvajal, and I. Kleiner.
Highly Correlated Ab Initio Study of Methyl Acetate Far Infrared Spectra.
J. Chem. Phys. **138**, 044319 (2013).

43. A. Spielfiedel, N. Feautrier, F. Najar, D. Ben Abdallah, F. Dayou, M. L. Senent, and F. Lique.
Erratum: Fine and Hyperfine Excitation of C₂H by Collisions with He at Low Temperature.
Mon. Not. R. Astron. Soc. **429**, 923 (2013).
44. P. Tarrío, M. Fernández-Méndez, and G.A. Mena Marugán.
Singularity Avoidance in the Hybrid Quantization of the Gowdy Model.
Physical Review D **88**, 084050 (2013).
45. M. Villa, M. L. Senent, and M. Carvajal.
Highly Correlated Ab Initio Study of the Low Frequency Modes of Propane and Various Monosubstituted Isotopologues Containing D and ¹³C.
PCCP **15**, 10258 (2013).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE ENVYMED DEPARTMENT

46. B. Pérez-Cerdán, B. Rubio, W. Gelletly, A. Algora, J. Agramunt, E. Nácher, J. L. Tain, P. Sarriguren, L. M. Fraile, M. J. G. Borge, L. Caballero, Ph. Dessagne, A. Jungclauss, G. Heitz, F. Marechal, E. Poirier, M. D. Salsac, and O. Tengblad.
Deformation of Sr and Rb Isotopes Close to the N = Z Line via Beta-Decay Studies Using the Total Absorption Technique.
Physical Review C **88**, 014324 (2013).

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

47. Yu Aksyutina, T. Aumann, K. Boretzky, M.J.G. Borge, C. Caesar, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U.D. Pramanik, H. Emling, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, A. Heinz, G. Ickert, H.T. Johansson, B. Jonson, R. Kulesa, C. Langer, T. LeBleis, K. Mahata, G. Munzenberg, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, S. Paschalis, W. Prokopowicz, R. Reifarh, D. Rossi, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, H. Simon, K. Summerer, O. Tengblad, R. Thies, H. Weick, and M.V. Zhukov.
Study of the Be-14 Continuum: Identification and Structure of its Second 2(+) State.
Physical Review Letters **111**, 242501 (2013).
48. Yu Aksyutina, T. Aumann, K. Boretzky, M.J.G. Borge, C. Caesar, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, H. Emling, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, G. Ickert, H.T. Johansson, B. Jonson, R. Kulesa, C. Langer, T. LeBleis, K. Mahata, G. Muenzenberg, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, S. Paschalis, W. Prokopowicz, R. Reifarh, D. Rossi, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, H. Simon, K. Summerer, O. Tengblad, H. Weick, and M.V. Zhukov.
Momentum Profile Analysis in One-Neutron Knockout from Borromean Nuclei.
Physics Letters B **718**, 1309 (2013).
49. Yu. Aksyutina, T. Aumann, K. Boretzky, M. J. G. Borge, C. Caesar, A. Chatillon, L. V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U.D. Pramanik, H. Emling, H. O. U. Fynbo, H. Geissel, G. Ickert, H. T. Johansson, B. Jonson, R. Kulesa, C. Langer, T. LeBleis, K. Mahata, G. Muenzenberg, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, S. Paschalis, W. Prokopowicz, R. Reifarh, D. Rossi, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, H. Simon, K. Summerer, O. Tengblad, H. Weick, and M. V. Zhukov.
Structure of the Unbound Nucleus Be-13: One-Neutron Knockout Reaction Data from Be-14 Analyzed in a Holistic Approach.
Physical Review C **87**, 064316 (2013).
50. G. Armelles, A. Cebollada, A. García-Martín, M. U. González, F. García, D. Meneses-Rodríguez, N. de Sousa, and L. S. Froufe-Pérez.
Mimicking Electromagnetically Induced Transparency in the Magneto-Optical Activity of Magnetoplasmonic Nanoresonators.
Optics Express **21**, 27356 (2013).

51. L. Audirac, A. Obertelli, P. Doornenbal, D. Mancusi, S. Takeuchi, N. Aoi, H. Baba, S. Boissinot, A. Boudard, A. Corsi, A. Gillibert, T. Isobe, A. Jungclaus, V. Lapoux, J. Lee, S. Leray, K. Matsui, M. Matsushita, T. Motobayashi, D. Nishimura, S. Ota, E.C. Pollacco, G. Potel, H. Sakurai, C. Santamaria, Y. Shiga, D. Sohler, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, and H. Wang.
Evaporation-Cost Dependence in Heavy-Ion Fragmentation.
Physical Review C **88**, 041602 (2013).
52. T. Aumann, K. Blaum, Y. Blumenfeld, A. Bonaccorso, M.J.G. Borge, L. Brink, A. Sharpy, J. Dilling, G.D. Dracoulis, C. Fahlander, C. Forssén, H.O.U. Fynbo, A. Gade, P.T. Greenlees, F. Gulminelli, K. Heyde, A. Heinz, M. Hjorth-Jensen, R.V.F. Janssens, K.L. Jones, B. Jonson, R. Kanungo, E. Khan, (...), P. Van Duppen, M. Zhukov et al.
Nobel Symposium 152: Physics with Radioactive Beams.
Physica Scripta **T152**, 010301 (2013).
53. M.J. G. Borge.
Beta-Delayed Particle Emission.
Physica Scripta **T152**, 014013 (2013).
54. M.J.G. Borge, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, B. Jonson, O.S. Kirsebom, T. Nilsson, G. Nyman, G. Possnert, K. Riisager, and O. Tengblad.
Rare Beta p Decays in Light Nuclei.
Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **40**, 035109 (2013).
55. C. Caesar, J. Simonis, T. Adachi, Y. Aksyutina, J. Alcantara, S. Altstadt, H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Barr, S. Beceiro, D. Bemmerer, J. Benlliure, C.A. Bertulani, K. Boretzky, M.J.G. Borge, G. Burgunder, M. Caamano, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkäll, S. Chakraborty, M. Chartier, L. Chulkov, (...), O. Tengblad, S. Terashima, R. Thies, Y. Togano et al.
Beyond the Neutron Drip Line: The Unbound Oxygen Isotopes ^{25}O and ^{26}O .
Physical Review C **88**, 034313 (2013).
56. J.J. Camacho, L. Díaz, J. P. Cid, and J.M.L. Poyato.
Time-Resolved Study of the Plasma-Plume Emission during the Nanosecond Ablation of Lithium Fluoride.
Spectrochimica Acta B **88**, 203 (2013).
57. M.V. Cañamares and A. Feis.
Surface-Enhanced Raman Spectra of the Neonicotinoid Pesticide Thiachloprid.
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 1126 (2013).
58. P. Carmona, M. Molina, M. Calero, F. Bermejo-Pareja, P. Martínez-Martín, and A. Toledano.
Discrimination Analysis of Blood Plasma Associated with Alzheimer's Disease Using Vibrational Spectroscopy.
Journal of Alzheimer's Disease **34**, 911 (2013).
59. M. Criado, S. Martínez-Ramírez, S. Fajardo, P.P. Gómez, and J.M. Bastidas.
Corrosion Rate and Corrosion Product Characterisation Using Raman Spectroscopy for Steel Embedded in Chloride Polluted Fly Ash Mortar.
Materials and Corrosion **64**, 372 (2013).
60. L. Díaz, J.J. Camacho, M. Sanz, M. Hernández, V. Jandova, and M. Castillejo.
Temporal Evolution Study of the Plasma Induced by CO_2 Pulsed Laser on Targets of Titanium Oxides.
Spectrochimica Acta B **86**, 88 (2013).
61. L. Díaz, L. Rubio, and J.J. Camacho.
Time Evolution of the Infrared Laser Induced Breakdown Spectroscopy of DNA bases Guanine and Adenine.
Applied Physics A **110**, 847 (2013).
62. M. Doncel, E. Sahin, A. Gadea, G. De Angelis, B. Quintana, J.J. Valiente-Dobón, V. Modamio, M. Albers, D. Bazzacco, E. Clément, L. Corradi, A. Dewald, G. Duchene, M.N. Erduran, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, R. Gernhäuser, A. Görgen, A. Gottardo, M. Hackstein, A. Hernández-Prieto, T.

- Hüyük, S. Klupp, W. Korten, A. Kusoglu, S. Lenzi, C. Louchart, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, G. Montagnoli, D. Montanari, O. Möller, D.R. Napoli, A. Obertelli, R. Orlandi, G. Pollarolo, F. Recchia, W. Rother, M-D. Salsac, F. Scarlassara, M. Schlarb, A. Stefanini, B. Sulignano, S. Szilner, and C.A. Ur.
Lifetime Measurements in Neutron-Rich Cu Isotopes.
Acta Physica Polonica B **44**, 505 (2013).
63. M. Eguiraun, J. Jugo, I. Arredondo, M. del Campo, J. Feuchtwanger, V. Etxebarria, and F.J. Bermejo.
ISHN Ion Source Control System. First Steps Toward an EPICS Based ESS-Bilbao Accelerator Control System.
IEEE Transactions On Nuclear Science **60**, 1280 (2013).
64. A. El Bakkali, T. Lamhasni, M. Haddad, S. Ait Lyazidi, S. Sánchez-Cortés, and E. del Puerto Nevado.
Non-Invasive Micro Raman, SERS and Visible Reflectance Analyses of Coloring Materials in Ancient Moroccan Islamic Manuscripts.
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 114 (2013).
65. J.P. Fernández-García, M. Cubero, 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. Shotter, O. Tengblad, and P. Walden.
Study of Li-11 Breakup on Pb-208 at Energies around the Coulomb Barrier.
Physical Review Letters **110**, 142701 (2013).
66. D.A. Fink, S.D. Richter, B. Bastin, K. Blaum, R. Catherall, T.E. Cocolios, D.V. Fedorov, V.M. Fedosseev, K.T. Flanagan, L. Ghys, A. Gottberg, N. Imai, T. Kron, N. Lecesne, K.M. Lynch, B.A. Marsh, T.M. Mendonca, D. Pauwels, E. Rapisarda, J.P. Ramos, R.E. Rossel, S. Rothe, M.D. Seliverstov, M. Sjödin, T. Stora, C. Van Beveren, and K.D.A. Wendt.
First Application of the Laser Ion Source and Trap (LIST) for On-Line Experiments at ISOLDE.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B **317**, 417 (2013).
67. M. Frías, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blasco, and M. Frías-Rodríguez.
Evolution of Mineralogical Phases by ^{27}Al and ^{29}Si NMR in $\text{MK-Ca}(\text{OH})_2$ System Cured at 60°C .
Journal of the American Ceramic Society **96**, 2306 (2013).
68. A. García-Leis, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
Silver Nanostars with High SERS Performance.
Journal of Physical Chemistry C **117**, 7791 (2013).
69. P. Golubev, A. Wendt, L. Scruton, J. Taprogge, D. Rudolph, P. Reiter, M. Bentley, V. Avdeichikov, P. Boutachkov, S.P. Fox, J. Gerl, Ch. Goergen, R. Hoischen, N. Kurz, B.S. Nara Singh, G. Pascovici, S. Pietri, H. Schaffner, M.J. Taylor, S. Thiel, and H.J. Wollersheim.
The Lund-York-Cologne Calorimeter (LYCCA): Concept, Design and Prototype Developments for a FAIR-NUSTAR Detector System to Discriminate Relativistic Heavy-Ion Reaction Products.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **723**, 55 (2013).
70. G. Guastalla, D. D. DiJulio, M. Gorska, J. Cederkall, P. Boutachkov, P. Golubev, S. Pietri, H. Grawe, F. Nowacki, K. Sieja, A. Algora, F. Ameil, T. Arici, A. Atac, M. A. Bentley, A. Blazhev, D. Bloor, S. Brambilla, N. Braun, F. Camera, Zs. Dombradi, C. Domingo Pardo, A. Estrade, F. Farinon, J. Gerl, N. Goel, J. Grebosz, T. Habermann, R. Hoischen, K. Jansson, J. Jolie, A. Jungclaus, I. Kojouharov, R. Knoebel, R. Kumar, J. Kurcewicz, N. Kurz, N. Lalovic, E. Merchan, K. Moschner, F. Naqvi, B.S. Nara Singh, J. Nyberg, C. Nociforo, A. Obertelli, M. Pfuetzner, N. Pietralla, Z. Podolyak, A. Prochazka, D. Ralet, P. Reiter, D. Rudolph, H. Schaffner, F. Schirru, L. Scruton, D. Sohler, T. Swaleh, J. Taprogge, Zs. Vajta, R. Wadsworth, N. Warr, H. Weick, A. Wendt, O. Wieland, J.S. Winfield, and H.J. Wollersheim.
Coulomb Excitation of Sn-104 and the Strength of the Sn-100 Shell Closure.
Physical Review Letters **110**, 172501 (2013).
71. K. Hadynska-Klek, P.J. Napiorkowski, A. Maj, F. Azaiez, M. Kicinska-Habior, J.J. Valiente-Dobon, G. de Angelis, T. Abraham, G. Anil Kumar, B.-Q. Arnes, D. Bazzacco, M. Bellato, D. Bortolato, P. Bednarczyk, G. Benzoni, L. Berti, B. Birkenbach, B. Bruyneel, S. Brambilla, F. Camera, J. Chavas, M. Ciemala, P.

- Cocconi, P. Coleman-Smith, A. Colombo, A. Corsi, F.C.L. Crespi, D.M. Cullen, A. Czermak, P. Desesquelles, B. Dulny, J. Eberth, E. Farnea, B. Fornal, S. Franchoo, A. Gadea, A. Giaz, A. Gottardo, X. Grave, J. Grebosz, M. Gulmini, T. Habermann, R. Isocrate, J. Iwanicki, G. Jaworski, A. Jungclaus, N. Karkour, M. Kmiecik, D. Karpinski, M. Kisielinski, N. Kondratyev, A. Korichi, M. Komorowska, M. Kowalczyk, W. Korten, M. Krzysiek, G. Lehaut, S. Leoni, A. Lopez-Martens, S. Lunardi, G. Maron, K. Mazurek, R. Menegazzo, D. Mengoni, E. Merchán, W. Meczynski, C. Michelagnoli, J. Mierzejewski, B. Million, P. Molini, S. Myalski, D.R. Napoli, R. Nicolini, M. Niikura, A. Obertelli, S.F. Ozmen, M. Palacz, A. Pullia, G. Rampazzo, F. Recchia, N. Redon, P. Reiter, D. Rosso, K. Rusek, E. Sahin, M.-D. Salsac, P.-A. Soderstrom, J. Srebrny, I. Stefan, O. Stezowski, J. Styczen, Ch. Theisen, N. Toniolo, C.A. Ur, V. Vandone, R. Wadsworth, B. Wasilewska, A. Wiens, K. Wrzosek-Lipska, M. Zielinska, and M. Zieblinski. *Towards the Determination of Superdeformation in ^{42}Ca* . *Acta Physica Polonica B* **44**, 617 (2013).
72. J. Igea, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela, and P. Lapuente. *Assessment of the Physico-Mechanical Behaviour of Gypsum-Lime Repair Mortars as a Function of Curing Time*. *Environmental Earth Science* **70**, 1605 (2013).
73. I. Iriepa and J. Bellanato. *Synthesis, Spectroscopic, Structural and Conformational Study of some Tri-Substituted Ureas Derived from N-Methylpiperazine Containing Phenyl and N-Heterocyclic Substituents*. *Journal of Molecular Structure* **1044**, 215 (2013).
74. I. Izquierdo-Lorenzo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés. *Vibrational Characterization and Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Probenecid Doping Drug*. *Journal of Raman Spectroscopy* **44**, 1422 (2013).
75. I. Izquierdo-Lorenzo, J. Kubackova, D. Manchon, A. Mosset, E. Cottancin, and S. Sánchez-Cortés. *Linking Ag Nanoparticles by Aliphatic Alpha, Omega-Dithiols: A Study of the Aggregation and Formation of Interparticle Hot Spots*. *Journal of Physical Chemistry C* **117**, 16203 (2013).
76. J.G. Johansen, V. Bildstein, M.J.G. Borge, M. Cubero, J. Diriken, J. Elseviers, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, L.P. Gaffney, R. Gernhäuser, B. Jonson, G.T. Koldste, J. Konki, T. Kröll, R. Krücken, D. Mücher, T. Nilsson, K. Nowak, J. Pakarinen, V. Pesudo, R. Raabe, K. Riisager, M. Seidlitz, O. Tengblad, H. Törnqvist, D. Voulot, N. Warr, F. Wenander, K. Wimmer, and H. De Witte. *Experimental Study of Bound States in ^{12}Be through Low-Energy $^{11}\text{Be}(d,p)$ -Transfer Reactions*. *Physical Review C* **88**, 044619 (2013).
77. D. Jordan, A. Algora, J.L. Taín, B. Rubio, J. Agramunt, A.B. Perez-Cerdan, F. Molina, L. Caballero, E. Náchter, A. Krasznahorkay, M.D. Hunyadi, J. Gulyás, A. Vitéz, M. Csatlós, L. Csige, J. Äystö, H. Penttilä, I.D. Moore, T. Eronen, A. Jokinen, A. Nieminen, J. Hakala, P. Karvonen, A. Kankainen, A. Saastamoinen, J. Rissanen, T. Kessler, C. Weber, J. Ronkainen, S. Rahaman, V. Elomaa, U. Hager, S. Rinta-Antila, T. Sonoda, K. Burkard, W. Hüller, L. Batist, W. Gelletly, A.L. Nichols, T. Yoshida, A.A. Sonzogno, K. Peräjärvi, A. Petrovici, K.W. Schmid, and A. Faessler. *Total Absorption Study of the β Decay of $^{102,104,105}\text{Tc}$* . *Physical Review C* **87**, 044318 (2013).
78. G.T. Koldste, B. Blank, M.J.G. Borge, J.A. Briz, M. Carmona-Gallardo, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, J. Giovinazzo, J.G. Johansen, A. Jokinen, B. Jonson, T. Kurturkian-Nieto, J.H. Kusk, J. T. Nilsson, A. Perea, V. Pesudo, E. Picado, K. Riisager, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J. -C. Thomas, and J. Van de Walle. *Relative Proton and Gamma Widths of Astrophysically Important States in ^{30}S Studied in the Beta-Delayed Decay of ^{31}Ar* . *Physical Review C* **87**, 055808 (2013).
79. M. Kronberger, A. Gottberg, T.M. Mendonca, J.P. Ramos, C. Seiffert, P. Suominen, and T. Stora. *Production of Molecular Sideband Radioisotope Beams at CERN-ISOLDE Using a Helicon-Type Plasma Ion Source*.

80. S. Lalkovski, A.M. Bruce, A. Jungclaus, M. Gorska, M. Pfutzner, L. Caceres, F. Naqvi, S. Pietri, Zs. Podolyak, G.S. Simpson, K. Andgren, P. Bednarczyk, T. Beck, J. Benlliure, G. Benzoni, E. Casarejos, B. Cederwall, F.C.L. Crespi, J.J. Cuenca-Garcia, I.J. Cullen, A.M.D. Bacelar, P. Detistov, P. Doornenbal, G.F. Farrelly, A.B. Garnsworthy, H. Geissel, W. Gelletly, J. Gerl, J. Grebosz, B. Hadinia, M. Hellstrom, C. Hinke, R. Hoischen, G. Ilie, G. Jaworski, J. Jolie, A. Khaplanov, S. Kisiov, M. Kmiecik, I. Kojouharov, R. Kumar, N. Kurz, A. Maj, S. Mandal, V. Modamio, F. Montes, S. Myalski, M. Palacz, W. Prokopowicz, P. Reiter, P.H. Regan, D. Rudolph, H. Schaffner, D. Sohler, S.J. Steer, S. Tashenov, J. Walker, P.M. Walker, H. Weick, E. Werner-Malento, O. Wieland, H.J. Wollersheim, and M. Zhekova.
Core-Coupled States and Split Proton-Neutron Quasiparticle Multiplets in $^{122-126}\text{Ag}$.
Physical Review C **87**, 034308 (2013).
81. K.L. Laursen, O.S. Kirsebom, H.O.U. Fynbo, A. Jokinen, M. Madurga, K. Riisager, A. Saastamoinen, O. Tengblad, and J. Aysto.
High-Statistics Measurement of the Beta-Delayed Alpha Spectrum of Na-20.
European Physical Journal A **49**, 79 (2013).
82. E. López-Tobar, M. Antalík, D. Jancura, M.V. Cañamares, A. García-Leis, D. Fedunova, G. Fabriciova, and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption and Detection of Amyloid Marker Thioflavin T on Ag Nanoparticles by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Journal of Physical Chemistry C **117**, 3996 (2013).
83. E. López-Tobar, B. Hernández, M. Ghomi, and S. Sánchez-Cortés.
Stability of the Disulfide Bond in Cystine Adsorbed on Silver and Gold Nanoparticles As Evidenced by SERS Data.
Journal of Physical Chemistry C **117**, 1531 (2013).
84. C. Louchart, A. Obertelli, A. Gorgen, W. Korten, D. Bazzacco, B. Birkenbach, B. Bruyneel, E. Clement, P.J. Coleman-Smith, L. Corradi, D. Curien, G. de Angelis, G. de France, J.-P. Delaroche, A. Dewald, F. Didierjean, M. Doncel, G. Duchene, J. Eberth, M.N. Erduran, E. Farnea, C. Finck, E. Fioretto, C. Fransen, A. Gadea, M. Girod, A. Gottardo, J. Grebosz, T. Habermann, M. Hackstein, T. Huyuk, J. Jolie, D. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, S. Klupp, R. Krucken, A. Kusoglu, S.M. Lenzi, J. Libert, J. Ljungvall, S. Lunardi, G. Maron, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, B. Million, P. Molini, O. Moller, G. Montagnoli, D. Montanari, D.R. Napoli, R. Orlandi, G. Pollarolo, A. Prieto, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, W. Rother, E. Sahin, M.-D. Salsac, F. Scarlassara, M. Schlarb, S. Siem, P.P. Singh, P.-A. Soderstrom, A.M. Stefanini, O. Stezowski, B. Sulignano, S. Szilner, Ch. Theisen, C.A. Ur, J.J. Valiente-Dobon, and M. Zielinska.
Collective Nature of Low-Lying Excitations in $^{70, 72, 74}\text{Zn}$ from Lifetime Measurements Using the AGATA Spectrometer Demonstrator.
Physical Review C **87**, 054302 (2013).
85. M. Magan, F. Sordo, L. Zanini, S. Terron, A. Ghiglini, F. Martínez, J.P. de Vicente, R. Vivanco, J.M. Perlado, F.J. Bermejo, F. Mezei, and G. Muhrer.
Neutronic Analysis of the Bi-Spectral Moderator such as that Proposed for ESS.
Nuclear Instruments & Methods In Physics Research A **729**, 417 (2013).
86. A.C.G. Marigliano, V.D.V. Campos, L. Fernández, M.L. Roldán, and H.N. Sólamo.
Spectroscopic and Thermodynamic Evidence of Dimer and Trimer Hydrogen Bonded Complex Formation between Chloroform and 2-Butanone. Excess Molar Enthalpy for the Chloroform + 2-Butanone Binary System at 303 K.
Journal of Physical Chemistry B **117**, 5121 (2013).
87. G. Marquínez-Durán, A.M. Sánchez-Benítez, I. Martel, L. Acosta, K. Rusek, M.A.G. Álvarez, R. Berjillos, M.J.G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J.A. Duenas, J.P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J.L. Flores, J. Gómez-Camacho, N. Keeley, J.A. Labrador, M. Marqués, A.M. Moro, M. Mazzocco, A. Pakou, V.V. Parkar, N. Patronis, V. Pesudo, D. Pierroutsakou, R. Raabe, R. Silvestri, N. Soic, L. Standlyo, I. Strojek, O. Tengblad, R. Wolski, and A.H. Ziad.
Elastic Scattering of He-8+Pb-208 at 22 MeV.

88. S. Martínez-Ramírez, L. Díaz, and J.J. Camacho.
CW CO₂-Laser-Induced Formation of Fulgurite on Lime-Pozzolan Mortar.
Journal of the American Ceramic Society **96**, 2824 (2013).
89. V. Modamio, J.J. Valiente-Dobon, S. Lunardi, S.M. Lenzi, A. Gadea, D. Mengoni, D. Bazzacco, A. Algora, P. Bednarczyk, G. Benzoni, B. Birkenbach, A. Bracco, B. Bruyneel, A. Burger, J. Chavas, L. Corradi, F.C.L. Crespi, G. de Angelis, P. Desesquelles, G. de France, R. Depalo, A. Dewald, M. Doncel, M.N. Erduran, E. Farnea, E. Fioretto, Ch. Fransen, K. Geibel, A. Gottardo, A. Gorgen, T. Habermann, M. Hackstein, H. Hess, T. Huyuk, P.R. John, J. Jolie, D. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, R. Kempley, S. Leoni, B. Melon, R. Menegazzo, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, B. Million, O. Moller, G. Montagnoli, D. Montanari, A. Nannini, D.R. Napoli, Zs. Podolyak, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, W. Rother, E. Sahin, M.D. Salsac, F. Scarlassara, K. Sieja, P.A. Soderstrom, A.M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, Ch. Theisen, B. Travers, and C.A. Ur.
Lifetime Measurements in Neutron-Rich ^{63,65}Co Isotopes Using the AGATA Demonstrator.
Physical Review C **88**, 044326 (2013).
90. J. Montaño, T. Giles, and A. Gottberg.
Design Upgrade of the ISOLDE Target Unit for HIE-ISOLDE.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B **317**, 430 (2013).
91. B. Olaizola, L.M. Fraile, H. Mach, A. Aprahamian, J.A. Briz, J. Cal-González, D. Ghita, U. Köster, W. Kurcewicz, S.R. Leshner, D. Pauwels, E. Picado, A. Poves, D. Radulov, G.S. Simpson, and J.M. Udías.
Beta- Decay of ⁶⁵Mn to ⁶⁵Fe.
Physical Review C **88**, 044306 (2013).
92. R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, L.S. Froufe-Pérez, J.J. Sáenz, and J.A. Sánchez-Gil.
Broadband Telecom Transparency of Semiconductor-Coated Metal Nanowires: More Transparent than Glass.
Optics Express **21**, 22076 (2013).
93. R. Paniagua-Domínguez, D.R. Abujetas, and J.A. Sánchez-Gil.
Ultra Low-Loss, Isotropic Optical Negative-Index Metamaterial Based on Hybrid Metal-Semiconductor Nanowires.
Scientific Reports **3**, 1507 (2013).
94. R. Paniagua-Domínguez, G. Grzela, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
Enhanced and Directional Emission of Semiconductor Nanowires Tailored through Leaky/Guided Modes.
Nanoscale **5**, 10582 (2013).
95. R. Paniagua-Domínguez, G. Grzela, J. Gómez Rivas, and J.A. Sánchez-Gil.
Semiconductor Nanowire Photoluminescence: Spatial/Polarization Averaged Coupling into Leaky Modes.
Proceedings of SPIE **8808**, 88080J (2013).
96. B. Pietras, M. Gascón, H. Álvarez-Pol, M. Bendel, T. Bloch, E. Casarejos, D. Cortina-Gil, I. Durán, E. Fiori, R. Gernhäuser, D. González, T. Kröll, T. Le Bleis, N. Montes, E. Nácher, M. Robles, A. Perea, J.A. Vilán, and M. Winkel.
CALIFA Barrel Prototype Detector Characterization.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **729**, 77 (2013).
97. N.H. Rodríguez, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela, S. Donatello, M. Guillén, J. Puig, C. Fos, E. Larrotcha, and J. Flores.
The Effect of Using Thermally Dried Sewage Sludge as an Alternative Fuel on Portland Cement Clinker Production.
Journal of Cleaner Production **52**, 94 (2013).
98. C. Ruiz-Capillas, P. Carmona, F. Jiménez-Colmenero, and A.M. Herrero.
Oil Bulking Agents Based on Polysaccharide Gels in Meat Batters: A Raman Spectroscopic Study.
Food Chemistry **141**, 3688 (2013).

99. I.F. Sáez del Bosque, M. Martín-Pastor, S. Martínez-Ramírez, and M.T. Blanco-Varela.
Effect of Temperature on C_3S and $C_3S + Nanosilica$ Hydration and C-S-H Gel Structure.
Journal of the American Ceramic Society **96**, 957 (2013).
100. I. Sáez del Bosque, S. Martínez-Ramírez, and M.T. Blanco-Varela.
Combined Effect of Amorphous Nanosilica and Temperature on White Portland Cement Hydration.
Industrial & Engineering Chemical Research **52**, 11866 (2013).
101. J. Sánchez del Río, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Perea, J. Sánchez, and O. Tengblad.
Fast Phoswich Scintillator Endcap for Gamma and Proton Detection.
AIP Conference Proceedings **1541**, 193 (2013).
102. V. Scuderi, A. Di Pietro, A. M. Moro, 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, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A. Maira Vidal, D. Voulot, F. Wenander, and M. Zadro.
Elastic Scattering for the Be-11+Zn-64 System close to the Coulomb Barrier.
Acta Physica Polonica B **44**, 463 (2013).
103. S.K.L. Sjøe, B.S.N. Singh, P. Adsley, L. Buchmann, M. Carmona-Gallardo, B. Davids, J. Fallis, B.R. Fulton, N. Galinski, U. Hager, M. Hass, D. Howell, D.A. Hutcheon, A.M. Laird, L. Martin, D. Ottewell, S. Reeve, C. Ruiz, G. Ruprecht, and S. Triambak.
Beam Suppression of the DRAGON Recoil Separator for He-3(Alpha,Gamma)Be-7.
Nuclear Instruments & Methods In Physics Research A **700**, 179 (2013).
104. P.-A. Söderström, G. Lorusso, H. Watanabe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Thiamova, F. Browne, G. Gey, H. S. Jung, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, Z. Y. Xu, H. Baba, G. Benzoni, K. Y. Chae, F. C. L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, F. G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. J. Lane, Z. Li, A. Montaner-Piza, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, A. Yagi, and K. Yoshinaga.
Shape Evolution in Ru-116, Ru-118: Triaxiality and Transition between the O(6) and U(5) Dynamical Symmetries.
Physical Review C **88**, 024301 (2013).
105. P.-A. Söderström, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, T. Sumikama, H. Watanabe, Z.Y. Xu, H. Baba, F. Browne, S. Go, G. Gey, T. Isobe, H.-S. Jung, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, N. Kurz, Y.K. Kwon, Z. Li, K. Moschner, T. Nakao, H. Nishibata, M. Nishimura, A. Odahara, H. Sakurai, H. Schaffner, T. Shimoda, J. Taprogge, Zs. Vajta, V. Werner, J. Wu, A. Yagi, and K. Yoshinaga.
Installation and Commissioning of EURICA – Euroball-RIKEN Cluster Array.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **317**, 649 (2013).
106. F. Sordo, S. Terrón, M. Magán, G. Muhrer, A. Ghiglini, F. Martínez, P.J. De Vicente, R. Vivanco, J.M. Perlado, and F.J. Bermejo.
Neutronic Design for ESS-Bilbao Neutron Source.
Nuclear Instruments & Methods In Physics Research A **707**, 1 (2013).
107. O. Tengblad, T. Nilsson, E. Nácher, H. T. Johansson, J. A. Briz, M. Carmona-Gallardo, C. Cruz, V. Gugliemina, A. Perea, J. Sanchez del Río, M. Turrión Nieves, J. Bergstrom, E. Blomberg, A. Bulling, E. Gallneby, J. Hagdahl, L. Jansson, K. Jareteg, R. Masgren, M. Nordstrom, G. Risting, S. Shojaei, and H. Wittler.
LaBr₃(Ce): LaCl₃(Ce) Phoswich with Pulse Shape Analysis for High Energy Gamma-Ray and Proton Identification.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **704**, 19 (2013).
108. S. Terrón, F. Sordo, M. Magán, A. Ghiglini, F. Martínez, J. P. De Vicente, R. Vivanco, J.M. Perlado, F.J. Bermejo, and A. Abánades.
Conceptual Design of the Beryllium Rotating Target for the ESS-Bilbao Facility.
Nuclear Instruments & Methods In Physics Research A **724**, 34 (2013).

- 109.D. Torrén-Martín, L. Fernández-Carrasco, and S. Martínez-Ramírez.
Hydration of Calcium Aluminates and Calcium Sulfoaluminates Studied by Raman Spectroscopy.
Cement and Concrete Research **47**, 43 (2013).
- 110.D. Torrén-Martín, L. Fernández-Carrasco, S. Martínez-Ramírez, J. Ibáñez, L. Artust, and T. Matschei.
Raman Spectroscopy of Anhydrous and Hydrated Calcium Aluminates and Sulfoaluminates.
Journal of the American Ceramic Society **96**, 3589 (2013).
- 111.V. Vandone, S. Leoni, G. Benzoni, N. Blasi, A. Bracco, S. Brambilla, C. Boiano, S. Bottoni, F. Camera, A. Corsi, F.C.L. Crespi, A. Giaz, B. Million, R. Nicolini, L. Pellegri, A. Pullia, O. Wieland, D. Bortolato, G. de Angelis, E. Calore, A. Gottardo, G. Maron, D.R. Napoli, D. Rosso, E. Sahin, J.J. Valiente-Dobon, D. Bazzacco, M. Bellato, E. Farnea, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, P. Molini, C. Michelagnoli, D. Montanari, F. Recchia, C.A. Ur, A. Gadea, T. Huyuk, N. Cieplicka, A. Maj, M. Kmiecik, A. Atac, S. Akkoyun, A. Kaskas, P.-A. Soderstrom, B. Birkenbach, B. Cederwall, P.J. Coleman-Smith, D.M. Cullen, P. Desesquelles, J. Eberth, A. Gorgen, J. Grebosz, H. Hess, D. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, P. Nolan, A. Obertelli, P. Reiter, M.D. Salsac, O. Stezowski, Ch. Theisen, M. Matsuo, and E. Vigezzi.
Global Properties of K Hindrance Probed by the γ Decay of the Warm Rotating ^{174}W Nucleus.
Physical Review C **88**, 034312 (2013).
- 112.G.S. Verebes, M. Melchiorre, A. Garcia-Leis, C. Ferreri, C. Marzetti, and A. Torreggiani.
Hyperspectral Enhanced Dark Field Microscopy for Imaging Blood Cells.
Journal of Biophotonics **6**, 960 (2013).
- 113.H. Watanabe, G. Lorusso, S. Nishimura, Z.Y. Xu, T. Sumikama, P.-A. Soederstroem, P. Doornenbal, F. Browne, G. Gey, H. S. Jung, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, A. Yagi, H. Baba, G. Benzoni, K.Y. Chae, F. C. L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y. K. Kim, I. Kojouharov, F. G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. J. Lane, Z. Li, C.-B. Moon, A. Montaner-Piza, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, D. Nishimura, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, and K. Yoshinaga.
Isomers in Pd-128 and Pd-126: Evidence for a Robust Shell Closure at the Neutron Magic Number 82 in Exotic Palladium Isotopes.
Physical Review Letters **111**, 152501 (2013).
- 114.R. Wirth, E. Fiori, B. Loeher, D. Savran, J. Silva, H. Álvarez Pol, D. Cortina Gil, B. Pietras, T. Bloch, T. Kroll, E. Nácher, A. Perea, O. Tengblad, M. Bendel, M. Dierigl, R. Gernhaeuser, T. Le Bleis, and M. Winkel.
Particle Identification Using Clustering Algorithms.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **717**, 77 (2013).
- 115.Y. Zheng, G. de France, E. Clement, A. Dijon, B. Cederwall, R. Wadsworth, T. Back, F. Ghazi Moradi, G. Jaworski, B.M. Nyako, J. Nyberg, M. Palacz, H. Al-Azri, G. de Angelis, A. Atac, O. Aktas, S. Bhattacharyya, T. Brock, P.J. Davies, A. Di Nitto, Zs. Dombradi, A. Gadea, J. Gal, P. Joshi, K. Juhasz, R. Julin, A. Jungclaus, G. Kalinka, J. Kownacki, G. La Rana, S.M. Lenzi, J. Molnar, R. Moro, D.R. Napoli, B.S. Nara Singh, A. Persson, F. Recchia, M. Sandzelius, J.-N. Scheurer, G. Sletten, D. Sohler, P.-A. Soderstrom, M.J. Taylor, J. Timar, J.J. Valiente-Dobon, and E.Vardaci.
 γ -Ray Linear Polarization Measurements and $(g_{9/2})^{-3}$ Neutron Alignment in ^{91}Ru .
Physical Review C **87**, 044328 (2013).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

- A.B. Pérez-Cerdán, B. Rubio, W. Gelletly, A. Algora, J. Agramunt, E. Nácher, J.L. Tain, P. Sarriguren, L. M. Fraile, M.J.G. Borge, L. Caballero, Ph. Dessagne, A. Jungclaus, G. Heitz, F. Marechal, E. Poirier, M.D. Salsac, and O. Tengblad.
Deformation of Sr and Rb Isotopes close to the $N = Z$ Line via Beta-Decay Studies Using the Total Absorption Technique.
Physical Review C **88**, 014324 (2013).

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

116. E. del Puerto, A. Cuesta, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
Electrochemical SERS Study on a Copper Electrode of the Insoluble Organic Pigment Quinacridone Quinine Using Ionic Liquids (BMIMCl and TBAN) as Dispersing Sgents.
Analyst **138**, 4670 (2013).
117. L. Guerrini, Z. Jurasekova, E. del Puerto, L. Hartsuiker, C. Domingo, J.V. García-Ramos, C. Otto, and S. Sánchez-Cortés.
Effect of Metal-Liquid Interface Composition on the Adsorption of a Cyanine Dye onto Gold Nanoparticles.
Langmuir **29**, 1139 (2013).

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

118. J. Aldegunde, P. Jambrina, E. García, V.J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and F.J. Aoiz.
Understanding the Reaction between Muonium Atoms and Hydrogen Molecules: Zero Point Energy, tunneling, and vibrational adiabaticity (Topical review).
Molecular Physics **111**, 3169 (2013).
119. H. Aouididi, M. Rotger, D. Bermejo, R.Z. Martínez, and V. Boudon.
High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the ν_1/ν_5 (C-H) Stretching Dyad of C_2H_4 .
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 590 (2013).
120. A. Ballandras, M. Cirtog, M.A. Loroño, M.T. Bourgeois, M. Rotger, D. Bermejo, R.Z. Martínez, J.L. Doménech, and V. Boudon.
High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the ν_2 and ν_3 Bands of C_2H_4 .
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 1033 (2013).
121. V. Boudon, D. Bermejo, and R.Z. Martínez.
High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the ν_1 , $2\nu_1-\nu_1$, ν_2 , $2\nu_2$ and $3\nu_2-\nu_2$ Bands of CF_4 .
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 731 (2013).
122. E. Carrasco, I. Tanarro, V.J. Herrero, and J. Cernicharo.
Proton Transfer Chains in Cold Plasmas of H_2 with Small Amounts of N_2 . The Prevalence of NH_4^+ .
Physical Chemistry Chemical Physics **15**, 1669 (2013).
123. J. Cernicharo, B. Tercero, A. Fuente, J.L. Doménech, M. Cueto, E. Carrasco, V.J. Herrero, I. Tanarro, N. Marcelino, E. Roueff, M. Gerin, and J. Pearson.
Detection of the Ammonium Ion in Space.
Astrophysical Journal Letters **771**, L10 (2013).
124. J.L. Doménech and M. Cueto
Sensitivity Enhancement in High Resolution Stimulated Raman Spectroscopy of Gases with Hollow-Core Photonic Crystal Fibers.
Optics Letters **38**, 4074 (2013).
125. J.L. Doménech, M. Cueto, V.J. Herrero, I. Tanarro, B. Tercero, A. Fuente, and J. Cernicharo.
Improved Determination of the 10-00 Rotational Transition of NH_3D^+ from the High Resolution Spectrum of the ν_4 Infrared Band.
Astrophysical Journal Letters **771**, L11 (2013).
126. R.M. Escribano, G.M. Muñoz Caro, G.A. Cruz-Díaz, Y. Rodríguez-Lazcano, and B. Maté.
Crystallization of CO_2 Ice and the Absence of Amorphous CO_2 Ice in Space.
Proceedings of the National Academy of Sciences **110**, 12899 (2013).

- 127.J.M. Fernández Navarro, J. Toudert, Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, and M. Jiménez de Castro.
Formation of Sub-Surface Silver Nanoparticles in Silver-Doped Sodium–Lead–Germanate Glass.
Applied Physics B **113**, 205 (2013).
- 128.O. Gálvez, J.C. Gómez Martín, P.C. Gómez, A. Saiz-López, and L.F. Pacios.
A Theoretical Study on the Formation of Iodine Oxides Aggregates and Monohydrates.
Physical Chemistry Chemical Physics **15**, 15572 (2013).
- 129.F. Gámez and A. Laura Benavides.
Perturbation Theory for Non-Spherical Fluids Based on Discretization of the Interactions.
Journal of Chemical Physics **138**, 124901 (2013).
- 130.F. Gámez, R.D. Acemel, and A. Cuetos.
Demixing and Nematic Behaviour of Oblate Hard Spherocylinders and Hard Spheres Mixtures: Monte Carlo Simulation and Parsons-Lee Theory.
Molecular Physics **111**, 3136 (2013).
- 131..C. Gómez Martín, O. Gálvez, M.T. Baeza-Romero, T. Ingham, and J.M.C. Plane.
On the Mechanism of Iodine Oxide Particle Formation.
Physical Chemistry Chemical Physics **15**, 15612 (2013).
- 132.S. Herranz, M. Marciello, D. Olea, M. Hernández, C. Domingo, M. Vélez, L. Gheber, J.M. Guisán, and M.C. Moreno-Bondi.
Dextran–Lipase Conjugates as Novel Tools for Low Molecular Weight Ligand Immobilization in Microarray Development.
Analytical Chemistry **85**, 7060 (2013).
- 133.M. Isenor, R. Escribano, T.C. Preston, and R. Signorell.
Predicting the Infrared Band Profiles for CO₂ Cloud Particles on Mars.
Icarus **273**, 591 (2013).
- 134.M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero, and I. Tanarro.
Energy Distributions of Neutrals and Charged Species in Hollow Cathode H₂ Discharges. A Study of Fast H Atoms.
Plasma Sources Science and Technology **22**, 025022 (2013).
- 135.W.J. Lafferty, J.M. Flaud, F. Kwabia-Tchana, and J.M. Fernández.
Raman and Infrared Spectra of the ν_1 Band of Oxirane.
Molecular Physics **111**, 1983 (2013).
- 136.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 **44**, 63 (2013).
- 137.R.Z. Martínez and D. Bermejo.
High-Resolution Stimulated Raman Study of the First Vibrational Hot Band of $^{14}\text{N}_2$. Separate Observation of the Spectra of the Ortho and Para Species.
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 727 (2013).
- 138.R.Z. Martínez, D. Bermejo, G. Di Lonardo, and L. Fusina.
High-Resolution Raman Spectroscopy of ν_2 and Associated Hot Bands of $^{13}\text{CH}^{12}\text{CH}$: Global Analysis of the Anharmonic Resonances.
Journal of Raman Spectroscopy **44**, 746 (2013).
- 139.S. Montero.
Temperature and Entropy in Supersonic Free Jets.
Physics of Fluids **25**, 056102 (2013).
- 140.M.A. Moreno, B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, P.C. Gómez, V.J. Herrero, and R. Escribano
The Structure and Spectroscopy of Cyanate and Bicarbonate Ions. Astrophysical Implications.

Journal of Physical Chemistry A, **117**, 9564 (2013).

- 141.J. Ortigoso and L. H. Coudert.
Torsional Effects in Molecular Alignment.
Physical Review A **87**, 043403 (2013).
- 142.J. Ortigoso, D. Fernández-Torre, and J. Santos.
Preparation and Control of Aligned Cyclic Rotational States.
Physical Review A **88**, 033418 (2013).
- 143.M. Oujja, M. Sanz, E. Rebollar, J.F. Marco, C. Domingo, P. Pouli, S. Kogou, C. Fotakis, and M. Castillejo.
Wavelength and Pulse Duration Effects on Laser Induced Changes on Raw Pigments Used in Paintings.
Spectrochimica Acta A **102**, 7 (2013).
- 144.F.C. Parra-Rojas, M. Passas, E. Carrasco, A. Luque, I. Tanarro, M. Simek, and F.J. Gordillo-Vázquez.
Spectroscopic Diagnostics of Laboratory Air Plasmas as a Benchmark for Spectral Rotational (Gas) Temperature Determination in TLEs.
Journal of Geophysical Research **118**, 4649 (2013).
- 145.Y. Rodríguez-Lazcano, V. Correcher, and J. García-Guinea.
Thermo- and Cathodoluminescence Properties of Lepidolite.
Spectrochimica Acta A **113**, 281 (2013).
- 146.Y. Rodríguez-Lazcano, V. Correcher, J. García-Guinea, and E. Cruz-Zaragoza.
Gamma Radiation-Induced Thermoluminescence Emission of Minerals Adhered to Mexican Sesame Seeds.
Radiation Physics and Chemistry **83**, 15 (2013).
- 147.T. Toney Fernández, P. Haro-González, B. Sotillo, M. Hernández, D. Jaque, P. Fernández, C. Domingo, J. Siegel, and J.Solís.
Ion Migration Assisted Inscription of High Refractive Index Contrast Waveguides by Femtosecond Laser Pulses in Phosphate Glass.
Optics Letters **38**, 5248 (2013).
- 148.A. Zanchet, M. Agúndez, V.J. Herrero, A. Aguado, and O. Roncero.
Sulphur Chemistry in the Interstellar Medium: The Effect of Vibrational Excitation of H_2 in the Reaction $S^+ + H_2 \rightarrow SH^+ + H$.
Astronomical Journal **146**, 3169 (2013).
- 149.A. Zanchet, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, V.J. Herrero, R. Escribano, and B. Maté.
Optical Constants of HN_3 and $NH_3:N_2$ Amorphous Ices in the Near-Infrared and Mid-Infrared Regions.
Astrophysical Journal **777**, 26 (2013).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- L. Guerrini, Z. Jurasekova, E. del Puerto, L. Hartsuiker, C. Domingo, J.V. García-Ramos, C. Otto, and S. Sánchez-Cortés.
Effect of Metal-Liquid Interface Composition on the Adsorption of a Cyanine Dye onto Gold Nanoparticles.
Langmuir **29**, 1139 (2013).
- E. del Puerto, A. Cuesta, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C.Domingo.
Electrochemical SERS Study on a Copper Electrode of the Insoluble Organic Pigment Quinacridone Quinone Using Ionic Liquids (BMIMCl and TBAN) as Dispersing Agents.
Analyst **138**, 4670 (2013).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / PUBLICATIONS IN COMMON WITH MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

- 150.E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, C. Domingo, P. Moreno, and M. Castillejo.
Assessment of Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Films.
Physical Chemistry Chemical Physics **15**, 11287 (2013).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- 151.S. Boufassa, R. Doufnoune, A. Hellati, N. Haddaoui, and M.E. Cagiao.
Effect of Compatibilizing Agents on the Physical Properties of iPP/HDPE Organoclay Blends.
Journal of Polymer Engineering **33**, 589 (2013).
- 152.M.J. Capitán, J. Álvarez, Y. Wang, R. Otero, M. Alcamí, F. Martín, and R. Miranda.
Onset of Chiral Adenine Surface Growth.
ChemPhysChem **14**, 3294 (2013).
- 153.V.L. Cruz, J. Ramos, M.N. Melo, and J. Martínez-Salazar.
Bacteriocin AS-48 Binding to Model Membranes and Pore Formation as Revealed by Coarse-Grained Simulations.
Biochimica et Biophysica Acta **1828**, 2524 (2013).
- 154.A. Flores, M. Naffakh, A.M. Díez-Pascual, F. Ania, and M.A. Gómez-Fatou.
Evaluating the Reinforcement of Inorganic Fullerene Nanoparticles in Thermoplastic Matrices by Depth-Sensing Indentation.
Journal of Physical Chemistry C **117**, 20936 (2013).
- 155.J.F. Franco-González, J. Ramos, V.L. Cruz, and J. Martínez-Salazar.
Conformational Flexibility of the ErbB2 Ectodomain and Trastuzumab Antibody Complex as Revealed by Molecular Dynamics and Principal Component Analysis.
Journal of Molecular Modeling **19**, 1227 (2013).
- 156.J.F. Franco-González, J. Ramos, V.L. Cruz, and J. Martínez-Salazar.
Simulation of Homology Models for the Extracellular Domains (ECD) of ErbB3, ErbB4 and the ErbB2-ErbB3 Complex in Their Active Conformations.
Journal of Molecular Modeling **19**, 931 (2013).
- 157.M.C. García-Gutiérrez, A. Linares, I. Martín-Fabiani, J.J. Hernández, M. Soccio, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, and M. Reynolds.
Understanding Crystallization Features of P(VDF-TrFE) Copolymers under Confinement to Optimize Ferroelectricity in Nanostructures.
Nanoscale **5**, 6006 (2013).
- 158.M. Gigli, A. Negroni, M. Soccio, G. Zanaroli, N. Lotti, F. Fava, and A. Munari.
Enzymatic Hydrolysis Studies on Novel Eco-Friendly Aliphatic Thiocopolyesters.
Polymer Degradation and Stability **98**, 934 (2013).
- 159.J. Giró-Paloma, J.J. Roa, A.M. Díez-Pascual, E. Rayón, A. Flores, M. Martínez, J.M. Chimenos, and A.I. Fernández.
Depth-Sensing Indentation Applied to Polymers: A Comparison between Standard Methods of Analysis in Relation to the Nature of the Materials.
European Polymer Journal **49**, 4047 (2013).
- 160.L. González-García, J. Parra-Barranco, J.R. Sánchez-Valencia, J. Ferrer, M.C. García-Gutiérrez, A. Barranco, and A.R. González-Elípe.
Tuning Dichroic Plasmon Resonance Modes of Gold Nanoparticles in Optical Thin Films.
Advanced Functional Materials **23**, 1655 (2013).
- 161.M. Hernández, A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra, and M.A. López Manchado.

- Structure and Segmental Dynamics Relationship in Natural Rubber/Layered Silicate Nanocomposites during Uniaxial Deformation.*
Macromolecules **46**, 3176 (2013).
- 162.T.M. Koller, M.H. Rausch, J. Ramos, P.S. Schulz, P. Wasserschied, I.G. Economou, and A.P. Fröba.
Thermophysical Properties of the Ionic Liquids [EMIM]B(CN)₄ and [HMIM][B(CN)₄].
Journal of Physical Chemistry B **117**, 8512 (2013).
- 163.S. Martín, M.T. Expósito, J.F. Vega, and J. Martínez-Salazar.
Microstructure and Properties of Branched Polyethylene: Application of a Three-Phase Structural Model.
Journal of Applied Polymer Science **128**, 1871 (2013).
- 164.J. Martín, A. Nogales, and M. Martín-González.
The Smectic-Isotropic Transition of P3HT Determines the Formation of Nanowires or Nanotubes into Porous Templates.
Macromolecules **46**, 1477 (2013).
- 165.J. Martín, A. Nogales, and C. Mijangos.
Directional Crystallization of 20 nm Width Polymer Nanorods by the Inducement of Heterogeneous Nuclei at Their Tips.
Macromolecules **46**, 7415 (2013).
- 166.I. Martín-Fabiani, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, A. Linares, J.J. Hernández, T.A. Ezquerra, and M. Reynolds.
Crystallization under One-Dimensional Confinement in Alumina Nanopores of Poly (Trimethylene Terephthalate) and Its Composites with Single Wall Carbon Nanotubes.
ACS Applied Materials & Interfaces **5**, 5324 (2013).
- 167.I. Martín-Fabiani, A. Linares, A. Nogales, and T.A. Ezquerra.
Dielectric Relaxation of Poly (Trimethylene Terephthalate) in a Broad Range of Crystallinity Polymer.
Polymer **54**, 5892 (2013).
- 168.I. Martín-Fabiani, J. Siegel, S. Riedel, J. Boneberg, T.A. Ezquerra, and A. Nogales.
Nanostructuring Thin Polymer Films with Optical Near Fields.
ACS Applied Materials & Interfaces **5**, 11402 (2013).
- 169.D.E. Martínez-Tong, M. Soccio, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, N. Alayo, F. Pérez-Murano, and T.A. Ezquerra.
Improving Information Density in Ferroelectric Polymer Films by Using Nanoimprinted Gratings.
Applied Physics Letters **102**, 191601 (2013).
- 170.D. Martínez-Tong, M. Soccio, A. Sanz, C. García, T.A. Ezquerra, and A. Nogales.
Chain Arrangement and Glass Transition Temperature Variations in Polymer Nanoparticles under 3D-Confinement.
Macromolecules **46**, 698 (2013).
- 171.K. Moorthi, K. Kamio, J. Ramos, and D.N. Theodorou.
Structure and Entanglements in Short Chain Branched Polyolefin Melts.
AIP Conference Proceedings **1518**, 455 (2013).
- 172.L.I. Olvera, M.T. Guzmán-Gutiérrez, M.G. Zolotukhin, S. Fomine, J. Cárdenas, F.A. Ruiz-Revino, D.Villers, T.A. Ezquerra, and E.Prokhorov.
Novel High Molecular Weight Aromatic Fluorinated Polymers from One-Pot, Metal-Free Step Polymerizations.
Macromolecules **46**, 7245 (2013).
- 173.J. Otegui, J.F. Vega, J. Ramos, and J. Martínez-Salazar.
Effect of High Molar Mass Species on Linear Viscoelastic Properties of Polyethylene Melts.
European Polymer Journal **49**, 2748 (2013).

- 174.A. Pabón, G. Escobar, E. Vargas, V. Cruz, R. Notario, S. Blair, and F. Echeverri.
Diosgenone Synthesis, Anti-Malarial Activity and QSAR of Analogues of This Natural Product.
Molecules **18**, 3356 (2013).
- 175.M. Pieruccini, A. Flores, and F. J. Baltá-Calleja.
Dependence of Conformational Relaxations on Nanoconfinement in Semicrystalline Poly(Ethylene Terephthalate).
Mechanics of Materials, **67**, 119 (2013).
- 176.M. Rosenthal, J.J. Hernandez, Y.I. Odarchenko, M. Soccio, N. Lotti, E. Di Cola, M. Burghammer, and Ivanov.
Non-Radial Growth of Helical Homopolymer Crystals: Breaking the Paradigm of the Polymer Spherulite Microstructure.
Macromolecular Rapid Communications **34**, 1815 (2013).
- 177.A. Sanz, T.A. Ezquerra, M.C. García-Gutiérrez, I. Puente-Orench, J. Campo, and A. Nogales.
Localized Translational Motions in Semicrystalline Poly(Ethylene Terephthalate) Studied by Incoherent Quasielastic Neutron Scattering.
European Physical Journal E **36**, 24 (2013).
- 178.M. Soccio, N. Lotti, and A. Munari.
Influence of Block Length on Crystallization Kinetics and Melting Behavior of Poly(Butylene/Thiodiethylene Succinate) Block Copolymers.
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry **114**, 667 (2013).
- 179.E. Vicente, J.L. Herraiz, S. España, E. Herranz, M. Desco, J.J. Vaquero, and J.M. Udías.
Improved Dead-Time Correction for PET Scanners: Application to Small-Animal PET.
Physics in Medicine and Biology **58**, 2059 (2013).

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

- E. Rebollar, J.R. Vázquez de Aldana, I. Martín-Fabiani, M. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, C. Domingo, P. Moreno, and M. Castillejo.
Assessment of Femtosecond Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Films.
Physical Chemistry Chemical Physics **15**, 11287 (2013).

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 E. Garrido, A.S. Jensen, D.V. Fedorov and J.G. Johansen.
Reply to "Comment on 'Three-body properties of low-lying ¹²Be resonances'".
Physical Review C **88**, 039802 (2013).

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

2. F.J. Bermejo, F. Fernández-Alonso, F. Sordo, A. Rivera, and J.M. Perlado.
Inspecciones no destructivas mediante haces de neutrones.
Nuclear España **345**, 43 (2013).

3. F.J. Bermejo and F. Sordo.
Neutron Sources.
Experimental Methods in the Physical Sciences, V. 44.
Academic Press, Elsevier, Chapter 2, 137.
ISSN: 1079-4042.
4. J.P. de Vicente, F. Fernández-Alonso, F. Sordo, and F.J. Bermejo.
Neutrons at ESS-Bilbao: From Production to Utilisation.
Technical Report: RAL-TR-2013-016.
Science & Technology Facilities Council, U.K.
ISSN 1358-6254.

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

5. P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
Molecular Characterization of Drugs Nanocarriers Based on Plasmon-Enhanced Spectroscopy: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS). [Caracterización molecular de nanoportadores de fármacos mediante espectroscopía intensificada por plasmones localizados: Fluorescencia (SEF) y Raman (SERS)].
Óptica Pura y Aplicada **46**, 111 (2013).

6.2.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

6. A.R. González-Elipe, F.J. Gordillo-Vázquez, F.L. Tabarés, and I. Tanarro.
Plasmas fríos moleculares. Química de plasmas.
Revista Española de Física **27**, 53 (2013).
7. K. McKarty, A. Sola, E. Anabitarte, N. Bordel, J. Cotrino, C. Gómez-Aleixandre, F.J. Gordillo-Vázquez, S. Mar, R. Martínez, G. Rodríguez, I. Tanarro, and J. Trujillo Bueno.
Desarrollo de diagnósticos para plasmas: catalizador de nueva física.
Revista Española de Física **27**, 25 (2013).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- P. Sevilla, M. Hernández, E. Corda, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
Molecular Characterization of Drugs Nanocarriers Based on Plasmon-Enhanced Spectroscopy: Fluorescence (SEF) and Raman (SERS). [Caracterización molecular de nanoportadores de fármacos mediante espectroscopía intensificada por plasmones localizados: Fluorescencia (SEF) y Raman (SERS)].
Óptica Pura y Aplicada **46**, 111 (2013).

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

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

1. G. Calcagni, L. Papantonopoulos, G. Siopsis, and N. Tsamis (eds.).
Quantum Gravity and Quantum Cosmology.
Lecture Notes in Physics **863**.
Springer-Verlag (Berlin, Germany, 2013).
ISBN 978-3-642-33035-3; DOI: 10.1007/978-3-642-33036-0.
2. J. Dukelsky and S. Pittel.
Exact Solutions for Pairing Interactions.

In "50 Years of Nuclear BCS", pp. 200-211, eds. R.A.Brogia and V.Zelevinsky.
World Scientific Publishing Co. (Singapore, 2013).
ISBN 978-981-4412-48-3.

3. M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov, and E. Moya de Guerra.
Nuclear Structure Evolution in Mg Isotopes between Proton and Neutron Drip Lines.
Proceedings of the 32st International Workshop on Nuclear Theory, Vol. **32**, 125-134 (2013).
Heron Press (Sofia, Bulgaria).
ISSN: 1313-2822.
4. M. Martín-Benito, D. Martín-de Blas, and G.A. Mena Marugán.
Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology with Matter: Approximate FRW Cosmologies from the Hybrid Gowdy Model with Matter.
Proceeding of the Xth International Conference on Gravitation, Astrophysics and Cosmology (ICGAC10),
p. 302-304, eds. R. Triay, J. T. Thanh Vân, and L. M. Celnikier.
The Gioi Publishers (Vietnam, 2013).
ISBN: 978-604-77-0619-8.

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

5. F.J. Bermejo and F. Sordo.
Technical Design Report: ESS-BILBAO Target Station.
Neutron Scattering – Fundamentals.
Edited by Félix Fernández-Alonso and David L. Price.
ESS-Bilbao Consortium Report Series.
ISBN: 978-84-695-8105-6.

6.3.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

6. M. Oujja, M. Sanz, M. Castillejo, P. Pouli, C. Fotakis. A. García, C. Romero, J.R. Vázquez de Aldana, P. Moreno, and C. Domingo.
Effect of Wavelength and Pulse Duration on Laser Cleaning of Paints.
"Science and Technology for the Conservation of Cultural Heritage", pp. 179-184, eds. M.A. Rogelio-Candelera, M. Lazzari, and E.Cano.
Taylor & Francis Group (London, 2013).
ISBN: 978-1-138-00009-4.

6.4 TESIS DOCTORALES / PH.D. THESES

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

Title: Cosmología Cuántica Inhomogénea: Teoría Cuántica de Campos y Gravedad de Lazos.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 17th of September 2013.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: Daniel Martín de Blas.

Supervisor: Guillermo Antonio Mena Marugán.

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

Title: Optical Properties of Metal/Dielectric Nanostructures and their Applications to Metamaterials: Light Propagation and Emission Control.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 18th of December 2013.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Ramón Paniagua Domínguez.

Supervisor: José A. Sánchez-Gil.

Title: Estudio de la forma del núcleo N=Z punto de espera ⁷²Kr a través de su desintegración beta.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 14th of November 2013.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: José Antonio Briz Monago.

Supervisor: M^a José García Borge y Enrique Nácher González.

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Nanoestructuración de materiales poliméricos con morfología controlada.

University: Facultad de C.C. Matemáticas. Universidad Complutense de Madrid.

Date: 18th of December 2013.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Ignacio Martín-Fabiani Carrato.

Supervisors: Tiberio Ezquerro Sanz and Amelia Linares Do Santos.

Title: Modelización de los procesos de cristalización de poliolefinas.

University: ETS de Ingenieros Agrónomos. Universidad Politécnica de Madrid,

Date: 22nd of November 2013.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Sara Sanmartín Sánchez.

Supervisors: Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Javier Ramos Díaz.

6.5 TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES / MASTER, GRADE AND OTHER DEGREES THESES

6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Unicidad de la Cuantización de Fock para Campos con Ecuaciones de Klein-Gordon Generalizadas en Cosmología.

Type: Master Thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 24th of September 2013.

Candidate: Laura Castelló Gomar.

Supervisor: Guillermo A. Mena Marugán.

Title: Loop Quantum Cosmology with Inhomogeneities.

Type: Undergraduate work (Trabajo Académicamente Dirigido)

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 8th of July 2013.

Candidate: Paula Tarrío Alonso.

Supervisor: Guillermo A. Mena Marugán and Luis J. Garay.

Title: **Electromagnetism and Fermions in Multifractional Spacetime.**
Type: **Undergraduate work (Trabajo Académicamente Dirigido)**
University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Date: 8th of July 2013.
Candidate: **David Rodríguez Fernández.**
Supervisor: **Gianluca Calcagni and Luis J. Garay Elizondo.**

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title:. **Dependence of Length Scale in Phase Separation on the Local and Segmental Dynamics in Baroplastic Polymers.**
Type: **Master Thesis**
University: Universidad Menéndez Pelayo.
Date: 17th of June 2013.
Mark: Sobresaliente.
Candidate: **Jing Cui.**
Supervisor: **Alejandro Sanz Parras.**

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

*Includes data of BSc courses.

	Expected 2009	2009	Expected 2010	2010	Expected 2011	2011	Expected 2012	2012	Expected 2013	2013
Number of ISI publications	165	166	152	174	163	186	173	182	182	179
Number of non- ISI publications	14	29	-	28	-	18	-	12	-	13
Total stock of PhD fellowships and contracts	26	34	-	25	-	23	-	18	-	18
Stock of postdoc fellowships and contracts	18	18	-	22	-	23	-	18	-	22
Number of PhD Theses defended	7	11	7	8	7	5	8	8	10	5
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	30	43,6	33,8	41,4	34,8	63,5	35,4	57,4*	36	82,4*

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2012)
Advanced Functional Materials	1	9.765
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	1	9.737
Physical Review Letters	5	7.943
Astrophysical Journal	2	6.733
Astrophysical Journal Letters	2	6.345
Nanoscale	2	6.233
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	1	6.036
Analytical Chemistry	1	5.695
Journal of High Energy Physics	1	5.618
Macromolecules	5	5.521
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	2	5.521
Journal of Physics G	1	5.326
ACS applied materials & interfaces	2	5.008
Astronomical Journal	1	4.965
Macromolecular Rapid Communications	1	4.929
Journal of Physical Chemistry C	5	4.814
Physical Review D	11	4.691
Physics Letters B	1	4.569
Nuclear Physics B	3	4.327
Langmuir	1	4.187
Journal of Alzheimer's Disease	1	4.174
Analyst	1	3.969
Physical Chemistry Chemical Physics	5	3.829
Applied Physics Letters	1	3.794
Physical Review B	5	3.767
Physical Review C	16	3.715
Journal of Physical Chemistry B	2	3.607
Classical and Quantum Gravity	3	3.562
Optics Express	2	3.546

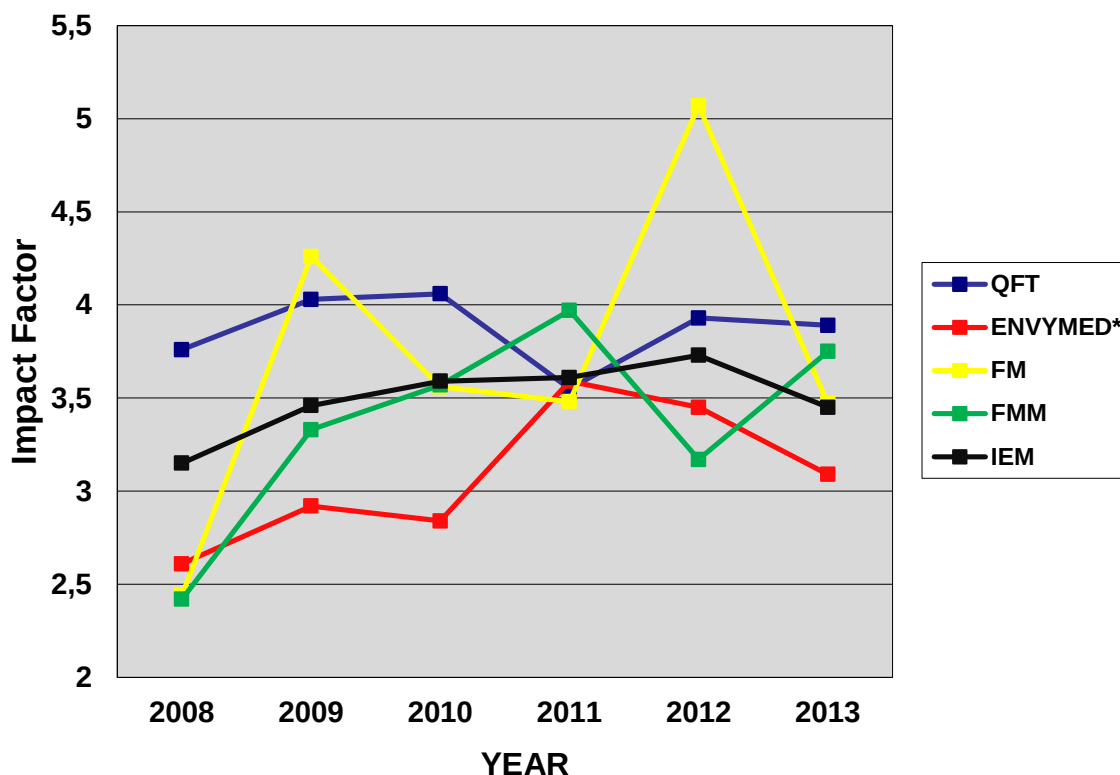
Journal of Cleaner Production	1	3.398
Biochimica et Biophysica Acta – Biomembranes	1	3.389
Optics Letters	2	3.385
Polymer	1	3.379
Chemphyschem	1	3.349
Food Chemistry	1	3.334
Journal of Chemical Physics	3	3.164
Icarus	1	3.161
Spectrochimica Acta B	2	3.141
Cement and Concrete Research	1	3.112
Journal of Biophotonics	1	3.099
Physical Review A	4	3.042
Scientific Reports	1	2.927
Journal of Physical Chemistry A	1	2.771
Polymer Degradation and Stability	1	2.770
Physics in Medicine and Biology	1	2.701
Journal of Raman Spectroscopy	9	2.679
European Polymer Journal	2	2.562
Plasma Sources Science & Technology	1	2.515
Molecules	1	2.428
Physical Review E	2	2.313
Industrial & Engineering Chemistry Research	1	2.206
Journal of the American Ceramic Society	4	2.107
European Physical Journal A	1	2.043
Journal of Molecular Modeling	2	1.984
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry	1	1.982
Spectrochimica Acta A	2	1.977
Physics of Fluids	1	1.942
Mechanics of Materials	1	1.936
European Physical Journal E	1	1.824
Applied Physics B	1	1.782
Molecular Physics	3	1.670
Applied Physics A	1	1.545
Annalen der Physik	1	1.510
Environmental Earth Sciences	1	1.445
Journal of Molecular Structure	1	1.404
Journal of Applied Polymer Science	1	1.395
Radiation Physics and Chemistry	1	1.375
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research B	4	1.266
IEEE Transactions on Nuclear Science	1	1.219
Materials and Corrosion-Werkstoffe und Korrosion	1	1.208
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A	8	1.142
International Journal of Modern Physics A	1	1.127
Physica Scripta	1	1.032
Acta Physica Polonica B	4	1.011
Journal of Combinatorial Theory B	1	0.845
Romanian Journal of Physics	2	0.526
Journal of Polymer Engineering	1	0.282
TOTAL:	171	Average Impact Factor: 3,45

Number of Journals: 77

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

Department Key:

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



* El Dpto.de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos de los años 2008 a 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componían: el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos/
The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the years 2008-2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón 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	-	2	2	3	-	-	1	16	4	20
ENVYMED	9	4	-	-	3	2	-	2	10	2	2	2	24	12	36
FM	11	3	1	-	2	3	-	-	1	1	1	-	16	7	23
FMM	6	6	1	-	1	1	1	1	4	1	2	1	15	10	25
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		10	-	10	10
IEM	33	14	3	-	9	6	3	5	18	4	5	14	71	43	114

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: 106

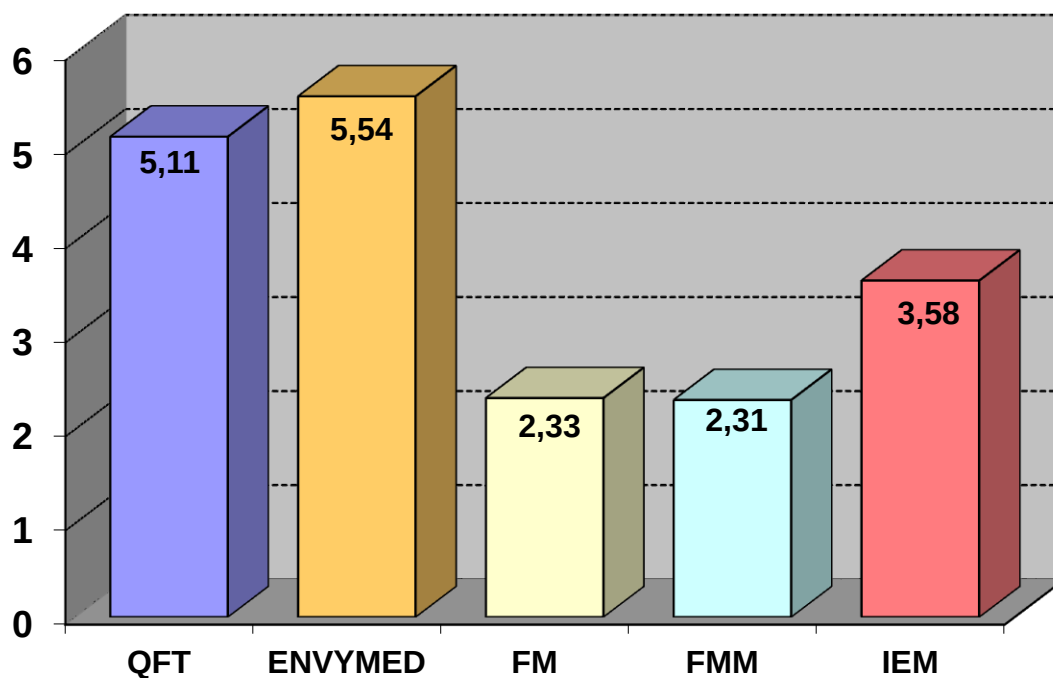
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	45(+1) ¹	69(+3) ¹	32(+3) ¹	29(+1) ¹	179
Other publications	5	4(+1) ¹	3(+1) ¹		13

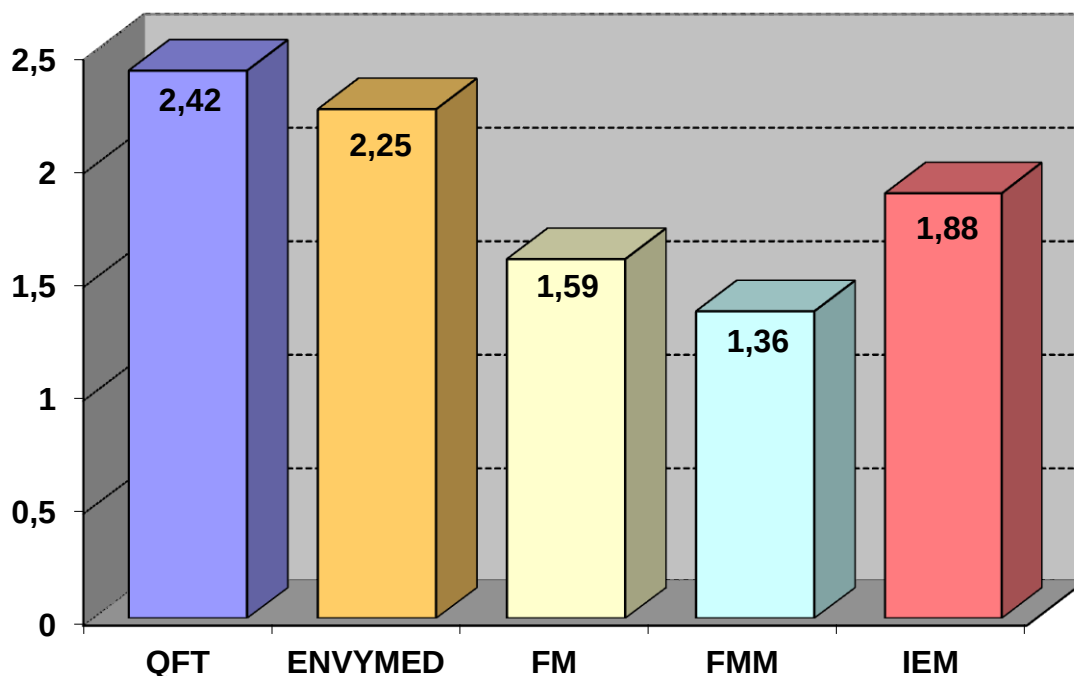
¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

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

- **Ratio por investigador senior** (plantilla más “Ramón y Cajal”) /
Ratio by senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”).



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) /
Ratio by scientific staff (excluding support staff).



(See “Department Key” in section 7.3)

Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal científico en plantilla /
Ratio of ISI publications of IEM per scientific staff researcher: 3, 81

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	10
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 de Medios Desordenados	23
2A.3 Dpto. de Física Molecular	33
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular	39
 2B. Research Activities.....	 47
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	49
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Dept.	56
2B.3 Molecular Physics Dept.	66
2B.4 Macromolecular Physics Dept.	71
 3. Proyectos de Investigación / Research Grants	 79
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	81
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	83
3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	85
3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	86
 4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation.....	 89
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings	91
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry.....	91
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	94

4.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	98
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	102
4.2	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	104
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	104
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	104
4.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	105
4.3	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....	105
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	105
4.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	106
4.4	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	106
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	106
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	107
4.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	108
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	108
5	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	109
5.1	Docencia / Teaching	111
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	111
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	111
5.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	112
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	112
5.2	Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	113
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	113
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	114
5.2.3	Dpto. de Física Molecular/Molecular Physics.....	114
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	115
5.3	Premios y Otros Méritos /Awards.....	115
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	115
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	116
5.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	116
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	117
5.4	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	118
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	118
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	120
5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	121

5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	122
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	122
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	122
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	123
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	123
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	123
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	124
5.6.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	124
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	125
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production	127
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	129
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	129
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	132
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	140
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	143
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	145
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	145
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	145
6.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	146
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	146
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	146
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	147
6.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	147
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	147
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	147
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	148
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	148
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	148
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	148
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	149

7	Tablas y Datos / Tables and Data	151
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan.....	153
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals ...	153
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	155
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	156
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	156
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	157