



Instituto de Estructura de la Materia

Memoria 2017

ANNUAL REPORT 2017



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



*Consejo Superior
de Investigaciones
Científicas*



MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES

INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) es un Instituto de Investigación sólidamente asentado en el CSIC y de gran visibilidad en España, en Europa y en la comunidad internacional. Con una reputación de excelencia, este Instituto intenta también ser atractivo para estudiantes, investigadores y visitantes.

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2017, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Astrofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física, Ciencia de los Materiales y Biofísica.

En sus comienzos en 1976 el instituto contaba con cinco científicos en plantilla. En la actualidad, acoge a unos cuarenta y dos investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

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

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

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

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2017 en 148 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a Research Institute deeply entrenched in the CSIC and highly visible in Spain, in Europe and in the international community. With a reputation for excellence, this Institute seeks to also be attractive to students, researchers and visitors.

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2017, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Astrophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry, Materials Science and Biophysics.

In its beginnings in 1976 the institute had five scientists on staff. Currently, IEM hosts around forty two permanent researchers distributed in the following Departments:

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

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

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

This scientific activity, during 2017, has crystallized in 148 ISI publications.

CAPÍTULO 1

ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1

INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / *DIRECTION*

Director / *Director*: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Vicedirector / *Assistant Director*: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Vicedirector / *Assistant Director*: Dr. José M. Fernández Sánchez
Gerente / *Manager*: D^a. Marta M^a Granja Perdices

JUNTA DE INSTITUTO / *INSTITUTE BOARD*

Presidente / *President*: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Secretaria / *Secretary*: D^a. Marta M^a Granja Perdices
Vocales / *Members*:
Dr. José Carlos Canalda Cámara
Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Dr. José M. Fernández Sánchez
Prof^a. M^a José García Borge (desde 30 de octubre) / (*since October 30th*)
Prof. José González Carmona
Dra. M^a Belén Maté Naya (desde 30 de octubre) / (*since October 30th*)
D. Miguel Ángel Moreno Alba
Dr. Juan Ortigoso Martínez (hasta 30 de octubre) / (*until October 30th*)
Dr. Santiago Sánchez Cortés (hasta 30 de octubre) / (*until October 30th*)
Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / *SCIENTIFIC STAFF*

Presidente / *President*: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Secretario / *Secretary*: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador / *Scientific staff*:

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
Dra. M^a Vega Cañamares Arribas
Dra. María José Capitán Aranda
Dr. Víctor Cruz Cañas
Dr. José Luis Doménech Martínez
Prof. Jorge Dukelsky Bercovich
Prof. Rafael Escribano Torres
Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Dr. Ricardo Fernández Perea
Dra. Araceli Flores Aguilar Amat
Dr. José M. Fernández Sánchez
Prof^a. María José García Borge
Dra. María Cruz García Gutiérrez
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dr. Vincenzo Giannini
Prof. José González Carmona
Prof. Víctor José 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. Enrique Nácher González
Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dra. M^a Luisa Senent Diez
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dr. Guzmán Tejeda Gala
Prof. Olof E. I. Tengblad
Dr. Vicente Timón Salinero
Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Pedro Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Pedro Sarriguren Suquibide

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. María Luisa Senent Diez

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Gianluca Calcagni

Investigador Contratado RyC / Tenure Track Contract R&C

Dra. Rosa Domínguez Gómez

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dr. Luis Javier Garay Elizondo

Doctor Vinculado / Adjoint Researcher

Dra. Elvira Moya Valgañón de Guerra

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

D^a M^a Concepción Pulido de Torres

Titulado Superior Contratado (hasta 15 de agosto) /
University Graduate (until August 15th)

D. Álvaro Rubio García

Contrato Predoctoral FPI (desde 1 de mayo) / Predoctoral
Contract FPI (since May 1st)

D^a María Benítez Galán

Autorización de Permanencia (hasta 1 de octubre) /
Authorized Stay (until October 1st)

D. Enrique Benito Matías

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dra. Laura Castelló Gomar

Autorización de Permanencia (desde 16 de mayo) / Authorized
Stay (since May 16th)

Dra. Beatriz Elizaga de Navascués

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D. Dennis Hove

Autorización de Permanencia (hasta 3 de febrero) /
Authorized Stay (until February 3rd)

D. Juan Margalef Bentabol

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dr. Daniel Martín de Blas

Autorización de Permanencia (hasta 30 de septiembre) /
Authorized Stay (until September 30th)

D^a Maika Martínez Guareño

Autorización de Permanencia (desde 2 de octubre) / Authorized
Stay (since October 2nd)

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D. Santiago Prado Loy

Autorización de Permanencia (desde 20 de septiembre) /
Authorized Stay (since September 20th)

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Prof.^a. M^a José García Borge

Profesora de Investigación (desde 30 de octubre) / *Research Professor (since October 30th)*

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico (hasta 30 de octubre) / *Research Scientist (until October 30th)*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Andrea Jungclauss

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vincenzo Giannini

Científico Titular (desde 27 de marzo) / *Tenured Scientist (since March 27th)*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Enrique Nácher González

Científico Titular (desde 18 de diciembre) / *Tenured Scientist (since December 18th)*

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada (hasta 2 de febrero) / *Adjoint Researcher (until February 2th)*

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

D. Álvaro Fernández Martínez

Titulado Superior Contratado / *University Graduate*

D. Miguel García Castaño

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (desde 1 de octubre) / *University Graduate Youth Guarantee Program (since October 1st)*

D. Moisés Martín Garrido

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (desde 1 de octubre) / *University Graduate Youth Guarantee Program (since October 1st)*

D. Javier Díaz Ovejas

Contrato Predoctoral FPI (desde 16 de abril) / *Predoctoral Contract FPI (since April 16th)*

D^a. Irene Marroquín Alonso

Contrato Predoctoral FPI/ *Predoctoral Contract FPI*

D. Diego Romero Abujetas

Contrato Predoctoral FPU / *Predoctoral Contract FPU*

D. Víctor Vaquero Soto

Contrato Predoctoral FPI / *Predoctoral Contract FPI*

D^a Silvia Viñals Onses

Contrato Predoctoral / *Predoctoral Contract*

Dra. Adianez García Leis

Autorización de Permanencia (del 5 al 30 de septiembre)/ *Authorized Stay (From September 5th to September 30th)*

D. Camilo Segura Paredes

Autorización de Permanencia (desde 15 de mayo hasta 30 de agosto) / *Authorized Stay (since May 15 until August 30th)*

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. Enrique Nácher González

Técnico Superior Especializado de OPIS (hasta 17 de diciembre) / *Specialized University Graduate OPIS (until December 17th)*

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS / *Specialist Technician OPIS*

D^a. Purificación Corchete Corchete

Ayudante de Investigación de OPIS/ *Research Assistant OPIS*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Jefe del Departamento / Head of Department:**Dra. M^a Belén MatéCientífica Titular (desde 30 de octubre) / *Tenured Scientist (since October 30th)*

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular (hasta 30 de octubre) / *Tenured Scientist (until October 30th)***Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Profesor 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 “ad honorem” / *Research Professor “ad honorem”*

Dr. José Luis Domenech Martínez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José María Fernández Sánchez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Científico Titular / *Tenured Scientist*

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*

D. Ramón J. Peláez de Fuentes

Titulado Superior Contratado (desde 15 de enero) / *University Graduate (since January 15th)*

D. Germán Molpeceres de Diego

Contrato Predoctoral FPI / *Predocctoral Contract FPI*

D. Néstor Badás Molpeceres

Autorización de Permanencia (del 3 de julio al 1 de septiembre) / *Authorized Stay (from 3rd July to September 1st)*

D. Francisco Colmenero Ruiz

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

D. Joel G. Fallaque Najara

Autorización de Permanencia (hasta 31 de enero) / *Authorized Stay (until January 31st)*

Dr. Óscar Gálvez González

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay***Personal de apoyo / Support Staff:**D^a. M^a Victoria Hoyos AlfonsoTécnico Superior Contratado Programa Garantía Juvenil de la C.M. (desde 1 de abril) / *Technician Contract Youth Guarantee Program of C.M. (since April 1st)*

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPIs*

D. Ángel González Valdenebro

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistan OPIs***DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

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

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. María José Capitán Aranda
 Dr. Victor Cruz Cañas
 Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat
 Dra. María Cruz García Gutiérrez
 Dra. Amelia Linares Dos Santos
 Prof. Francisco José Baltá Calleja

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 D^a Anna Espasa Valdepeñas

D. Edgar Gutiérrez Fernández

D^a. Patricia Enrique Jiménez
 D. Álvaro Rodríguez Rodríguez

D. Miguel Ángel Gutiérrez Cruz

Denisse Guadalupe Moctezuma Delgado

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Profesor de Investigación “Ad honorem” (hasta 18 de septiembre) / *Research Professor “Ad honorem” (until September 18th)*

Investigador Contratado RyC / *Tenure Track Contract R&C.*

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil / *University Graduate Youth Guarantee Program*

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil / *University Graduate Youth Guarantee Program*

Contrato Predoctoral FPI / *Predoctoral Contract FPI*

Contrato Predoctoral FPI (hasta 22 de septiembre) / *Predoctoral Contract FPI (until September 22nd)*

Autorización de Permanencia (desde 3 de mayo a 28 de agosto) / *Authorized Stay (since May 3rd until August 28th)*

Autorización de Permanencia (desde 3 de mayo a 31 de julio) / *Authorized Stay (since May 3rd until July 31st)*

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

D. Guillermo Juárez Segura

Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Técnico Superior Especializado de OPIS / *Specialized University Graduate OPIs*

Técnico Superior Contratado Programa Garantía Juvenil / *Technician Contract Youth Guarantee Program.*

Técnico Superior Especializado de OPIS (desde 19 de abril) / *Specialized University Graduate OPIs (since 19th of April)*

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA **FINANCES AND ADMINISTRATION**

D^a. Marta M^a Granja Perdices
 D^a. Rosario Carrasco Nicolás
 D^a. Purificación Díez Rodríguez

D^a. Alicia Fernández Clavero
 D^a. Ana María García Arribas
 D^a. Carmen García Collado
 D^a. Beatriz Gil Sánchez

D^a. Isabel Lombán Botello

Gerente en funciones / *Manager*

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

C. General Administrativo de la Admon. del Estado / *General Administration*

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

C. General Administrativo de la Administración del Estado / *General Administration*

Auxiliar OO.AA. / *Auxiliary OO.AA.*

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

ALMACÉN / WAREHOUSE

D^a. Clara Isabel Cardeñosa García

C. General Administrativo de la Administración del Estado /
General Administration

D. José Manuel Segura González

C. Auxiliar de Telecomunicaciones / *Auxiliary Telec.*

BIBLIOTECA / LIBRARY

D^a. Flora Granizo Barrena

Técnico Biblioteca y Documentación/*Library and Doc. Specialist*

D. José Antonio Rodríguez Valcárcer

Ayudante de Biblioteca y Documentación (desde 14 de julio) /
(since July 14th)

CONSERJERÍA / RECEPTION

D^a. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes / *Common Services Assistant*

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

D. Luis Fernández Felipe

Técnico Auxiliar Informático de la Administración (hasta 7 de
septiembre) / *IT Technical Auxiliaries (until September 7th)*

D. Francisco Daniel Rincón Fuentes

Técnico Especializado de OPIS / *Technical Specialized OPIs*

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Joaquín Delgado Hernández

Contrato Programa Garantía Juvenil del CSIC (hasta 12 de
diciembre) / *Contract of Youth Guarantee Program CSIC (until December 12th)*

D. Fernando Pueyo García

Técnico Especialista Grado Medio de OPIS / *Technical Specialist OPIs*

D. José Ramón Paredes Rodríguez

Contrato INEM (desde 29 de diciembre) / *INEM Contract (since December 29st)*

D. Francisco Tello Garrido

Contrato INEM (desde 29 de diciembre) / *INEM Contract (since December 29st)*

D. Sergio Yubero Martínez

Contrato INEM (hasta 31 de marzo) / *INEM Contract (until March 31st)*

TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano

Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco

Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mantenimiento y
Profesionales / *Technical and Professional Activities Technician*

CAPÍTULO 2A

LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Teoría de la Materia Condensada
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica, a la Atmósfera y al estudio de Nuevos Materiales

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravedad y Cosmología Cuánticas de Lazos.
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Teorías de gravedad cuántica y geometría multi-fractal.
- Gravedad y teorías de campos no-locales.
- Agujeros negros.
- Teorías de campos y geometría.
- 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.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Modelos integrables cuánticos
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Interacciones de Van der Waals en ZIFs
- Fotodisociación de radicales orgánicos

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.
- Métodos numéricos para la solución de ecuaciones no lineales acopladas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hiperesféricos
- Grupo de renormalización.
- Teoría de Floquet.
- Geometría fractal y de sistemas complejos.
- Operadores no-locales y ecuación de difusión.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN

Durante 2017, el Grupo de Gravitación y Cosmología ha realizado progresos sustanciales en la investigación de criterios que seleccionan una única representación de Fock de campos cuánticos en espaciotiempos curvos. Esta línea de investigación es de máximo interés en cosmología, ya que permite extraer resultados robustos, eliminando ambigüedades en las predicciones cuánticas que de otra manera plagarían la teoría. Estos resultados de unicidad también son importantes en la medida en que proporcionan una forma única de separar la dinámica cuántica de los campos de la del espaciotiempo de fondo, algo que es necesario si también se quiere proceder a una descripción cuántica de la geometría. Además, los resultados tienen aplicaciones en otras áreas de la física, como la información cuántica o la materia condensada, ya que permite determinar una familia única de vacíos en situaciones donde el fondo no es estacionario, y dar una descripción muy adecuada de la dinámica si uno quiere discutir temas como la conservación de la información. Nuestro Grupo ha logrado ampliar sus resultados anteriores sobre los criterios que seleccionan una familia única de cuantizaciones de Fock equivalentes para campos escalares en fondos homogéneos e isótropos, extendiéndolos al caso de algunos espaciotiempos anisótropos. Además, los resultados se han generalizado también a campos de Dirac en escenarios cosmológicos.

Utilizando esta generalización y combinando la cuantización de Fock de los campos fermiónicos con una cuantización de lazos de la geometría, se ha llevado a cabo un análisis completo de las perturbaciones cosmológicas en presencia de un campo de Dirac (tratado también como una perturbación). Se ha demostrado que los fermiones no afectan significativamente las perturbaciones cosmológicas en las eras pre-inflacionarias e inflacionarias, siempre que el vacío se elija en la familia escogida por nuestros criterios. Además, entre los vacíos de esta familia, hay suficiente libertad para seleccionar un vacío adecuado de modo que la contribución de los fermiones al hamiltoniano se haga finita y no necesite regularización.

En añadidura a estos estudios, el Grupo ha investigado en gran detalle, tanto analítica como numéricamente, las consecuencias de una cuantización híbrida en el marco de la cosmología cuántica de lazos para las perturbaciones primordiales, obteniendo predicciones para el fondo cósmico de microondas y comparándolas con los datos recopilados por la misión Planck. Con este objetivo, se han completado análisis previos sobre las perturbaciones escalares y se han incorporado modos tensoriales. Se ha calculado el espectro de potencia de estas perturbaciones para una variedad de estados de vacío, analizando la relación tensor-escalar y la relación de consistencia entre esta cantidad y el índice espectral tensorial. El Grupo ha calculado las funciones de correlación temperatura-temperatura, eléctrica-eléctrica, temperatura-eléctrica y magnética-magnética. Se han discutido los efectos de la geometría cuántica en estas funciones de correlación y se han confrontado los resultados numéricos con las observaciones.

Durante los últimos años se han desarrollado modelos teóricos en los que efectos cuánticos macroscópicos en agujeros negros pueden dar lugar a modificaciones de las señales de ondas gravitatorias caracterizadas por la existencia de repeticiones amortiguadas de la señal primaria. Por ejemplo, la cuantización del campo gravitatorio puede permitir la existencia de un canal de decaimiento de agujeros negros en agujeros blancos con simetría bajo inversión temporal. Se ha llevado a cabo la integración funcional sobre un conjunto de geometrías con simetría esférica utilizando una sola variable que interpola entre las geometrías de agujero negro y agujero blanco en una región espaciotemporal acotada. Se ha obtenido una distribución de probabilidad finita con un decaimiento exponencial en la anchura de dicha región con una vida media inversamente proporcional a la masa de Schwarzschild. Las propuestas que dan lugar a la existencia de ecos en la señal tardía de ondas gravitatorias producidas en la coalescencia de agujeros negros comparten la característica de que los agujeros negros deben ser reemplazados por configuraciones sin horizontes con una superficie física reflectante en las frecuencias relevantes. Por otro lado, las propuestas que restringen los efectos cuánticos en la geometría externa a los perturbativos, como los obtenidos a partir de la complementariedad, no presentan ecos.

También se ha revisitado la motivación y la construcción de una teoría unificada de la electrodinámica y la gravedad, siguiendo las ideas de Weyl. Se ha visto que las ecuaciones del campo gravitatorio son equivalentes a las de Einstein (sin traza), asegurando así la compatibilidad con los tests de la relatividad general. Por tanto, la constante cosmológica efectiva resulta ser radiativamente estable debido a la invariancia Weyl. Esto también conlleva la existencia de una energía por debajo de la que la no integrabilidad de las distancias espaciotemporales y la masa efectiva del campo electromagnético aparecen simultáneamente. También se ha visto que las críticas previas en contra de las ideas de Weyl pierden su poder en esta versión.

El año 2017 ha marcado un importante avance en el estudio de las llamadas teorías multi-fraccionarias, un enfoque de gravedad cuántica que ha sido desarrollado en nuestro departamento a partir de 2012. En estas teorías de gravedad y de campos, la estructura del espaciotiempo es la típica de los multi-fractales. Hemos puesto cotas observacionales muy fuertes procedentes tanto de las recientes observaciones de ondas gravitatorias por parte de LIGO como de los eventos de rayos cósmicos de energía ultra-elevada. Además, hemos cuantificado y especificado la relación entre estas teorías y los enfoques de espaciotiempos no-conmutativos; dicha relación fue conjeturada hace bastante tiempo sin haber nunca sido aclarada de manera satisfactoria, hasta la fecha de hoy. Hemos encontrado que los dos enfoques son independientes, a pesar de muchas similitudes. El hito más importante, sin embargo, ha sido la formulación de un principio geométrico que determina de forma unívoca la medida de la geometría, así consagrando las teorías multi-fraccionarias y sus parientes con medidas no-factorizables como los únicos candidatos para describir geometrías espaciotemporales genuinamente multi-fractales. Todo esto se recoge también en un artículo de revisión que constituye el *manifesto* más actualizado de este enfoque teórico. Posteriormente, se abordaron otros aspectos de la teoría, incluso el comportamiento de agujeros negros y la posibilidad de huellas observables en la radiación cósmica de fondo, más otro logro fundamental: es decir, el “descubrimiento” teórico de que el flujo dimensional (el cambio de la dimensión del espaciotiempo con la escala de observación) típico de todas las gravedades cuánticas es físicamente equivalente al fenómeno de la borrosidad, donde las incertidumbre en mediciones físicas es debida a fluctuaciones cuánticas de la geometría del espaciotiempo. El establecimiento de esta dualidad conlleva una parsimonia conceptual que tendrá consecuencias no solo en las teorías multi-fraccionarias, sino también en todas las demás gravedades cuánticas.

Utilizando las mismas herramientas de geometría anómala empleadas en las teorías multi-fraccionarias, hemos también demostrado un teorema que relaciona la dimensión espectral del espaciotiempo y la posibilidad de obtener una entropía de entrelazamiento del espaciotiempo finita. Este trabajo recibió una Mención de Honor en los **2017 Awards for Essays on Gravitation de la Gravity Research Foundation**.

Por último, respecto al enfoque de la gravedad cuántica no-local (independiente de los ya mencionados) donde la dinámica es caracterizada por operadores con infinitas derivadas, hemos demostrado que las soluciones de Schwarzschild (agujero negro) existen y son estables, al menos en una versión específica de dicha teoría. Esto implica que las teorías no-locales no están exentas de singularidades, contrariamente a lo que se había creído hasta hoy. Por tanto, por sí misma la no-localidad es insuficiente para garantizar la ausencia de infinitos. Queda por demostrar esta conclusión para las versiones súper-renormalizables de la teoría.

Por lo que respecta al trabajo sobre la formulación hamiltoniana de teorías de campos no estándar (modelos que acoplan objetos de diferentes dimensiones y en regiones espaciales acotadas con condiciones de contorno generales) los principales resultados obtenidos se refieren a la implementación unitaria de la dinámica cuántica en modelos de campos escalares en dimensión $1 + 1$ sujetos a condiciones de contorno de tipo Dirichlet, Neumann o Robin y la introducción de operadores de traza en el contexto de la cuantización de sistemas unidimensionales acoplados a partículas puntuales.

En lo que se refiere al primer tema, el principal resultado que hemos obtenido es la caracterización de las clases de equivalencia de *embeddings* espaciales para los que es posible tener evolución unitaria. Hasta la fecha este tipo de análisis había sido realizado solo para el caso del círculo, donde no se necesitan condiciones de contorno. La introducción de fronteras restringe la clase de secciones espaciales en las que es posible tener evolución unitaria, lo que nos obliga, por lo tanto, a obtener una caracterización concreta de los mismos. Nuestros resultados no solo proporcionan una comprensión útil de la cuantización de Fock de estos modelos en foliaciones espaciotemporales generales, sino que también pueden ser útiles para estudiar esquemas más exóticos de cuantización, como los poliméricos.

Los resultados en teorías de campos en las que se acoplan objetos de diferentes dimensiones complementan los obtenidos por el grupo en años anteriores. En particular, hemos hecho una propuesta concreta para introducir espacios de Hilbert auxiliares para los objetos dinámicos situados en los bordes y los operadores necesarios para describir su dinámica (los llamados operadores de traza). Este es un problema interesante porque los espacios de Hilbert de estos modelos compuestos no pueden ser factorizados como productos tensoriales de espacios de Hilbert asociados de forma natural con la parte continua (cuerda) y las partículas puntuales unidas a sus extremos. El conocimiento actual sobre este tipo de sistemas abre la posibilidad de usarlos para modelar fenómenos cuánticos complicados relacionados con el problema de medición y el estudio del límite clásico, que planeamos abordar en el futuro inmediato.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Propiedades de la desintegración beta en núcleos ricos en neutrones

Durante el presente año se ha continuado con el estudio de las propiedades de desintegración beta en distintas regiones de masa nuclear, especialmente regiones ricas en neutrones, caracterizadas por estados fundamentales deformados. En particular, se ha estudiado sistemáticamente la región nuclear de las tierras raras que participan directamente en los procesos astrofísicos de captura rápida de neutrones (procesos *r*) y que generan el llamado 'pico de tierras raras' que aparece en el patrón de abundancias isotópicas observado en torno a masas $A=160$. En el trabajo se estudian los isótopos de Xe, Ba, Ce, Nd, Sm, Gd y Dy con número de neutrones comprendidos entre $N=86$ y $N=126$.

El principal interés del estudio de las propiedades de desintegración nucleares en estos núcleos radica en sus implicaciones en la nucleosíntesis estelar y procesos *r*. Estos procesos están considerados en la actualidad como el mecanismo más importante de producción de elementos pesados ricos en neutrones en el universo y se cree que más de la mitad de los elementos más pesados que el hierro tienen su origen en estos procesos estelares. Sus vidas medias determinan en buena medida tanto las posibles trayectorias de los procesos *r* y sus bifurcaciones como las respectivas abundancias finales de los distintos núcleos tal y como son observadas en la naturaleza. A pesar del gran esfuerzo experimental para determinar las vidas medias de estos núcleos exóticos y debido a las bajas tasas de producción en el laboratorio para estos núcleos altamente inestables, es aún necesario recurrir a estimaciones teóricas con poder predictivo en la mayoría de los casos.

El modelo teórico en el que basamos este estudio consiste en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) con campos medios obtenidos autoconsistentemente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme y correlaciones de apareamiento. Se incluyen así mismo fuerzas residuales de tipo espín-isospín tanto en el canal partícula-hueco como en el canal partícula-partícula. Las deformaciones correspondientes al núcleo en equilibrio se obtienen autoconsistentemente estudiando las superficies de energía que nos muestran la energía del núcleo para cada posible deformación nuclear. Conviene también indicar que los núcleos en la región de tierras raras son hoy en día intratables por los modelos de capas y por tanto modelos basados en QRPA son probablemente la mejor opción para su estudio.

Nuestro trabajo ha servido para determinar tanto vidas medias de desintegración como probabilidades de emisión de neutrones retardados. Se han calculado también las más detalladas distribuciones energéticas de la intensidad Gamow-Teller que caracterizan la desintegración ocurrida. Los resultados para los isótopos más cercanos al valle de estabilidad

se han comparado con las todavía escasas vidas medias experimentales obteniendo un buen acuerdo con ellas. El resto de resultados para núcleos más inestables aparecen como predicciones para ser contrastadas con experimentos que en la actualidad se están llevando a cabo en RIKEN (Japón) y MSU (USA), así como para ser utilizadas en simulaciones astrofísicas.

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

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

Sistemas de tres cuerpos (núcleos con halo) con interacciones de campo medio

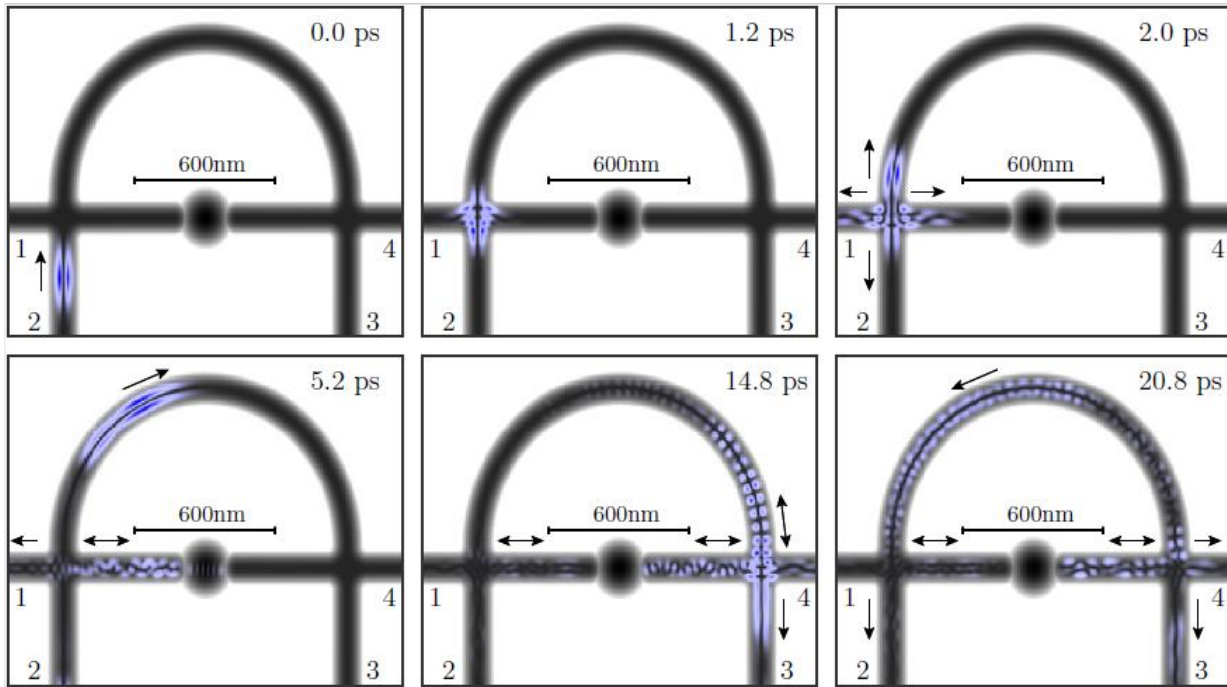
Un aspecto importante de la tarea llevada a cabo durante estos últimos meses ha sido el desarrollo un nuevo método que permite construir la interacción entre *clusters* de partículas a partir de un cálculo estándar de campo medio. Más concretamente, la idea es tener en cuenta la estructura del *core* para construir una interacción de campo medio que es la que sienten los nucleones del halo. De este modo se combinan los grados de libertad de pocos y muchos cuerpos, y desarrollamos una herramienta computacional eficiente aplicable a estados ligados y del continuo, y que en principio es aplicable a distintos campos de la física. Formulamos pues un modelo de tres cuerpos autoconsistente para describir un *core* rodeado por dos nucleones de valencia, en el que el *core* se trata mediante una aproximación de campo medio con una interacción de Skyrme efectiva. En un primer cálculo, este nuevo método ha sido aplicado al ^{26}O (^{24}O más dos neutrones), siendo capaces de reproducir tanto los datos experimentales existentes como los resultados obtenidos con otros modelos fenomenológicos con más parámetros. Se obtiene también que la desintegración del estado fundamental se corresponde con una desintegración directa en el continuo, sin contribución de desintegración secuencial a través de la resonancia $d_{3/2}$ del ^{25}O , resonancia que se obtiene también del cálculo numérico, y cuya energía reproduce la información experimental correspondiente.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Sistemas mesoscópicos desordenados y transporte cuántico

Hemos estudiado la repulsión de niveles y su relación con la longitud de localización en un cable cuántico desordenado excitado con luz monocromática polarizada linealmente. El modelo que usamos para describir este sistema físico es el modelo de Anderson-Floquet. En el régimen de alta frecuencia, el escalado lineal entre la longitud de localización dividida por la longitud del sistema y la repulsión espectral es el mismo que en el modelo de Anderson sin perturbación, aunque ambas cantidades dependen de los parámetros del campo externo. Sin embargo, en el régimen de baja frecuencia la repulsión de niveles depende principalmente del valor de la amplitud del campo externo y se pierde la proporcionalidad entre la repulsión de niveles y la longitud de localización.

También hemos realizado simulaciones de la evolución temporal de paquetes de onda a través de interferómetros electrónicos Aharonov-Bohm con un punto cuántico en uno de los brazos. Estos dispositivos pueden servir para medir la fase de la transmisión a través del punto cuántico. Sin embargo, se tiene que tener mucho cuidado al analizar la influencia de los procesos de difusión de los electrones en las uniones de los brazos del interferómetro. Los cálculos fueron realizados utilizando algoritmos de evolución temporal cuántica implementados en GPUs. En este sentido, hemos demostrado que los lapsos en la fase de transmisión entre picos consecutivos y la modulación de las alturas de los picos de bloqueo de Coulomb están muy relacionados y sus correlaciones se podrían medir experimentalmente.



Instantáneas de la evolución temporal de un paquete de ondas en un interferómetro electrónico de Aharonov-Bohm con un punto cuántico en uno de sus brazos.

Modelos integrables cuánticos

El modelo BCS, de interés en materia condensada y física nuclear, fue resuelto exactamente por Richardson para sistemas discretos en la década de los 60. También se demostró que, en el límite termodinámico, equivalente al continuo, la solución exacta coincide con la aproximación de BCS. Sin embargo, hay problemas importantes en estructura nuclear en que sistemas finitos ligados o sus resonancias requieren la mezcla de niveles monoparticulares discretos con el continuo. Para poder desarrollar un modelo exactamente soluble extendimos la solución exacta de Richardson a la base de Bergreen que incluye estados ligados, resonancias y el continuo no resonante. Como comprobación, resolvimos las ecuaciones de Bethe resultantes y verificamos los resultados numéricos coinciden con la diagonalización exacta del modelo de capas de Gamow utilizando la misma interacción.

Los modelos integrables cuánticos, que pueden resolverse exactamente para sistemas grandes con complejidad polinomial, son excelentes tests para teorías de muchos cuerpos modernas. Como ejemplo de estas aproximaciones, la teoría de Coupled Cluster y el Hartree-Fock proyectado en simetrías son dos paradigmas centrales en la teoría de la estructura electrónica. Sin embargo, ambas teorías son muy diferentes. Coupled Cluster tiene éxito para describir correlaciones débiles, pero falla para correlaciones fuertes a menos que se permita la ruptura de simetrías que es no física para sistemas pequeños. La proyección de simetrías es efectiva para tratar correlaciones fuertes a nivel de campo medio, pero a diferencia de Coupled Cluster no es extensiva ni trata las correlaciones débiles. Examinamos distintos escenarios para combinar estas teorías en el marco de los modelos integrables de Lipkin y Agassi, que a pesar de su simplicidad contienen física no trivial y se pueden diagonalizar para sistemas de muchas partículas. Mostramos como proyección de simetrías y Coupled Cluster fallan en distintos regímenes, mientras aproximaciones que combinan ambas son exitosas en el diagrama de fases completo. A pesar de la simplicidad de los modelos, las lecciones extraídas serán de gran utilidad para el desarrollo de teorías ab initio de Coupled Cluster proyectado en simetrías que esperamos sean precisas en los límites débil y fuerte como así también en regiones intermedias.

Transporte electrónico en semimetales topológicos en tres dimensiones

La correspondencia frontera/volumen y la protección topológica de los estados de borde están en la base de las interesantes propiedades que presentan los sistemas con estructura de bandas topológicamente no triviales. Mientras que en los semimetales de Weyl y Dirac en tres dimensiones los estados de superficie forman los así llamados arcos de Fermi, conectando la proyección de los nodos sobre la superficie en cuestión, los semimetales con línea de nodos muestran una colección más amplia de estados de superficie dando lugar a una variedad con forma de tambor dentro de la proyección del círculo de nodos. En tanto que esta línea de nodos y los estados de superficie asociados están protegidos en este tipo de semimetales, resulta pertinente estudiar su evolución bajo diversas perturbaciones, lo que puede ayudar a controlar las fuertes correlaciones resultantes en la superficie del sistema electrónico. En este contexto, hemos procedido a investigar el comportamiento de los semimetales con línea de nodos en campos magnéticos intensos, llegando a demostrar que tales sistemas electrónicos pueden ser guiados a una fase de tipo aislante topológico en la que el transporte electrónico tiene lugar a través de corrientes quirales en la superficie del material.

Más concretamente, hemos descubierto el potencial que tienen los semimetales con línea de nodos en tres dimensiones para desarrollar un fenómeno que es análogo al efecto Hall cuántico pero promovido en este caso a una dimensión espacial superior. Hemos demostrado que, cuando el campo magnético está orientado perpendicularmente a la línea de nodos, los estados evanescentes del semimetal permanecen estabilizados en un nivel de energía cero con una degeneración en dos parámetros que surge del colapso de un número muy grande de niveles de Landau de tipo bidimensional. Hemos encontrado también que hay una razón profunda para la protección topológica de estos estados de Landau de superficie en tanto que corresponden a puntos excepcionales, es decir, puntos de rama que surgen de la extensión del espectro para valores complejos del momento. En este marco, hemos visto que se pueden utilizar las propiedades de dichos puntos excepcionales para dar cuenta de la cuantización del efecto Hall en bloques tridimensionales de semimetales con línea de nodos.

Muy notablemente, hemos encontrado también que un campo magnético paralelo a la línea de nodos tiene por efecto el apareamiento de las ondas evanescentes en el grueso del semimetal, dando lugar a estados que residen en películas bidimensionales paralelas dentro del material tridimensional. Esto constituye un caso perfecto de efecto Hall cuántico en tres dimensiones, del que sólo se conocen unos pocos ejemplos. Hemos visto que, en láminas delgadas de semimetales con línea de nodos, los estados de Landau con una extensión bidimensional genuina forman una banda plana en el grueso del semimetal, mientras que empiezan a adquirir dispersión cuando se aproximan a su superficie. Esto explica que el transporte electrónico tenga lugar a través de estados quirales de superficie, que son el análogo de las excitaciones de borde en este caso exótico de efecto Hall en tres dimensiones.

Hemos llevado a cabo cálculos numéricos para poder estimar que el efecto Hall de superficie puede sobrevivir en general cuando el semimetal con línea de nodos está sujeto a perturbaciones con una intensidad por debajo de la brecha abierta entre el nivel de Landau de energía cero y las bandas adyacentes. Hemos visto sin embargo que, cuando las perturbaciones preservan la simetría partícula-hueco del sistema electrónico, la estructura compleja ligada a los puntos excepcionales presta mucha mayor estabilidad a las bandas planas de energía cero del espectro. En este caso, la conductividad Hall se puede expresar en términos de la integral de una conexión de Berry apropiada, de la misma forma que en el efecto Hall en dos dimensiones. Como contrapartida, hemos demostrado también que la estructura compleja del espectro (para valores complejos del momento) permite expresar el número de bandas planas a energía cero en términos de un nuevo invariante topológico, contando esencialmente el número de puntos excepcionales y asegurando su carácter topológico por la imposibilidad de deshacer los puntos de rama mediante perturbaciones regulares del espectro.

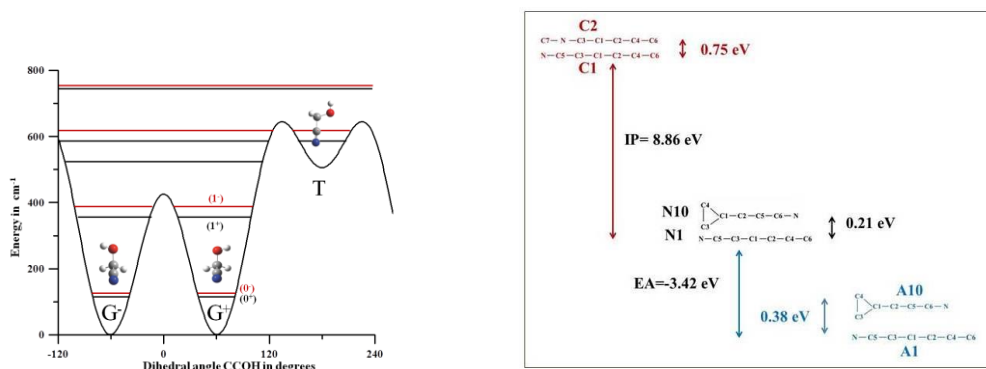
QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA Y AL ESTUDIOS DE NUEVOS MATERIALES

El grupo emplea métodos ab initio altamente correlacionados para caracterizar especies moleculares y procesos químicos de interés astrofísico, para describir nuevos materiales con aplicación a la captación y almacenamiento de CO₂ y para la determinación de los estados electrónicos de Rydberg y disociativos de radicales orgánicos.

Durante el año 2017, hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en dos sub-líneas de investigación: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas. 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. 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 incluyendo la terrestre. Durante estos últimos años, se ha centrado la investigación en el estudio de cianuros orgánicos.

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 2017, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_6N en colaboración con investigadores de la Universidad King Saud de Ryad. En colaboración con el laboratorio de Astrofísica del Instituto de Física de Rennes y dentro del proyecto AnionCOS estamos estudiando aniones de pequeñas cadenas carbonadas. 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. Hay que destacar el estudio de los 66 isómeros del radical insaturado C_6N .

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 2017, se ha prestado atención especial a las moléculas orgánicas de gran complejidad que presentan enlaces de hidrógenos intramoleculares, como el etilen-glicol. En colaboración con el laboratorio de microondas de la Universidad de Lille, se han estudiado varios cianuros orgánicos como el $NC-CH_2OH$ o el $NC-CCC-CH_2OH$.



Los últimos estudios que se han realizado en el marco de Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, se refieren a la interacción del CO_2 y de contaminantes 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. Durante 2017, hemos enfatizado en el estudio de la competencia entre el CO_2 y otros gases de efecto invernadero (CO , SO_2 , NH_3) al ser captados por la ZIF's.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estructura nuclear a energías intermedias.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Espectroscopía sobre superficies.
- Bioespectroscopía.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.
- Aplicaciones Biológicas de la Espectroscopía Vibracional intensificada por nanoestructuras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para Fuentes de neutrones.
- 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.
- Biofuncionalización de nanopartículas plasmónicas.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula y biodiagnos.
- Identificación de marcadores espectroscópicos infrarrojos y Raman para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas y neoplásicas.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
- Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Plasmónica cuántica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL, en la instalación ISOLDE y REXISOLDE@CERN.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativísticas en el experimento R3B@GSI.
- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.

- Espectroscopia Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Espectroscopia Infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopia Visible-UV.
- Espectroscopia de Fluorescencia.
- Microscopia Electrónica de Transmisión (TEM) y de Barrido (SEM).
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopia Infrarroja (FTIR).
- Espectroscopia Infrarroja.
- Espectroscopia Raman (FT1, Normal, Micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopia Óptica de Emisión (OES).
- Deposición Asistida por Láser.
- Análisis Estadístico Multivariante.
- Espectroscopia Raman.
- Técnicas de Imaging resueltas espacial y temporalmente.

LABOR INVESTIGADORA:

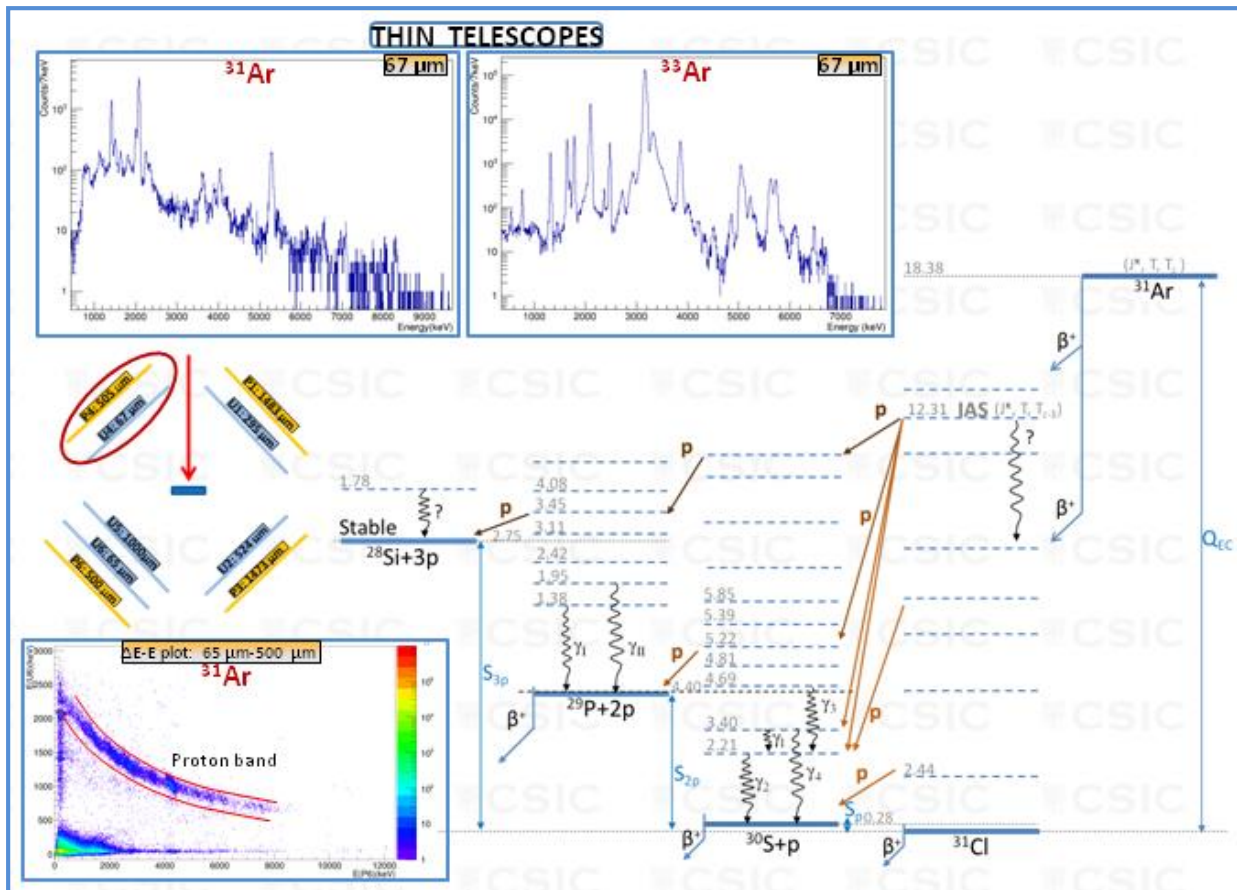
EXPERIMENTO IS577: ESTUDIO DE ESTRUCTURA NUCLEAR DE ^{31}Ar @ ISOLDE (CERN)

(Proyecto FPA2012-32443, estudiante de doctorado FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Nácher, Ángel Perea)

Nuestro isótopo de interés en este estudio es ^{31}Ar . Es un núcleo exótico ligero, situado cerca de la línea de goteo de protones. Se trata de un emisor de protones β -retardado con alto Q_β y baja energía de separación protónica. Como consecuencia, muchos canales de desintegración son accesibles, con lo que ^{31}Ar puede emitir un protón, dos protones e incluso tres protones, después de sufrir una desintegración β . Los objetivos de nuestro trabajo son principalmente dos: el análisis de los canales $\beta 2p$, $\beta 3p$ y la desintegración del IAS (Estado Isobárico Análogo) del ^{31}Cl (el núcleo emisor ^{31}Cl es el hijo de ^{31}Ar).

La desintegración de ^{31}Ar fue medido en el experimento IS577 en la línea de haz ISOLDE Decay Station (IDS), localizada en ISOLDE-CERN (Ginebra, Suiza), convirtiéndose en el primer experimento de su clase (emisión de partículas) realizado con éxito en la instalación IDS. Es una nueva estación permanente dedicada a medidas de desintegración β compuesta por 4 clovers de HPGe (germanio hiperpuro) para la detección de rayos γ que rodean la cámara experimental. Dicha cámara puede ser adaptada y ajustada para diferentes tipos de medidas de desintegración β (tiempo de vuelo de neutrones, emisión de partículas cargadas, etc.). En este caso, usamos la llamada MAGISOL Si-Plugin chamber, diseñada y testeada en nuestro grupo (IEM-CSIC), bajo la colaboración internacional MAGISOL (Madrid-Aarhus-Goteborg). En su interior se encuentra un conjunto de 5 detectores de silicio segmentados (DSSSD 5x5 cm, 16x16 bandas) y 4 detectores no segmentados (PADs), en configuración telescopio para la detección de partículas β y cargadas. Este sistema es muy compacto con gran eficiencia protónica (45% sobre 4π), baja energía de *cut off* así como buena resolución energética (25 keV) y angular (3°).

La desintegración de ^{33}Ar también fue medido en este experimento. Permite una completa determinación de la calibración energética y geométrica del setup. Gracias al excelente sistema de detección, hemos visto nuevos picos de protones no observados previamente por otros trabajos similares. Con respecto a ^{31}Ar , se ha visto una alta fragmentación de IAS, que puebla todos los niveles de ^{30}S , se han propuesto nuevos niveles energéticos en ^{31}Cl y se ha hecho una clara identificación de niveles cercanos al threshold en ^{30}S (interés astrofísico). El análisis, que se encuentra en progreso, forma parte de la tesis de la estudiante Irene Marroquín.

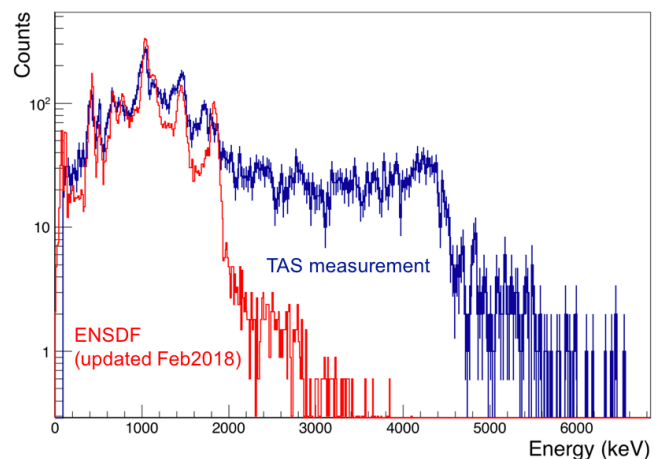
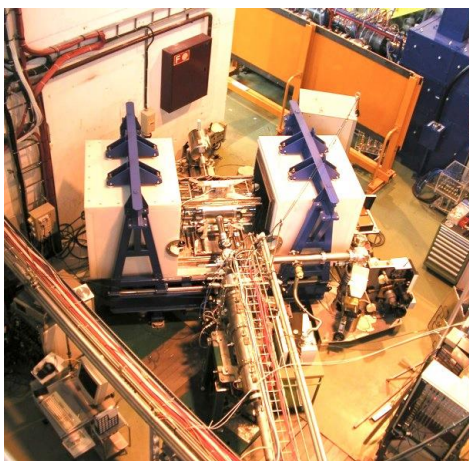


Espectros 1p de los telescopios son mostrados junto con los ΔE -E plots bidimensionales y el array de detectores DSSSD (U1-U6) and PAD (P1-P6) usados en el experimento. El esquema de niveles de ^{31}Ar es también incluido. Gracias a las buenas características del setup, los espectros tienen buena resolución a bajas y altas energías. Nuevos protones son observados y su identificación de niveles puede ser hecha.

EXPERIMENTO IS570: DESINTEGRACIÓN BETA DE LOS $N=Z$, “WAITING POINTS” DEL PROCESO RP: ^{64}Ge , ^{68}Se Y LOS $N=Z+2$: ^{66}Ge , ^{70}Se PARA UNA DETERMINACIÓN PRECISA DE LAS TASAS DE DESINTEGRACIÓN DÉBIL ESTELARES
(Enrique Nácher, Olof Tengblad, Ángel Perea)

Medimos en ISOLDE (en 2015) la desintegración beta del ^{64}Ge y ^{66}Ge por su importancia en la determinación de las tasas de desintegración débil en algunos procesos estelares explosivos como son los “x-ray bursts”. Estos escenarios son fundamentales en la nucleosíntesis por proceso de captura rápida de protones (proceso rp). Utilizamos la técnica de espectroscopía de absorción total por su gran eficiencia para determinar la distribución de intensidad beta en estas desintegraciones.

En 2017 hemos avanzado en el análisis de datos y ya tenemos espectros en los que podemos ver toda la parte de la desintegración que no se había visto hasta ahora por falta de eficiencia de detección.



IS633: CAPTURA ELECTRÓNICA DEL ^8B A LOS ESTADOS EXCITADOS DE ALTA ENERGÍA DEL ^8Be (Doctorando Silvia Viñals i Onsès, Olof Tengblad)

El núcleo de ^8B es el único caso conocido que en su estado fundamental presenta una configuración halo de un protón, es decir, uno de sus protones tiene una muy baja energía de enlace y orbita como un satélite alrededor del core de ^7Be . En su desintegración beta (β) puebla un gran rango de energías de excitación del núcleo hijo cuya estructura a baja energía ha sido estudiada en detalle en relación a la producción de los neutrinos solares. Los estados de energía de excitación en ^8B de interés para esta tesis son el doblete de estado 2^+ , a 16.6 MeV y 16.9 MeV. El objetivo de este trabajo es, por una parte, determinar la población relativa de estos estados y, a partir de ello, deducir la configuración de isospín. Además, se pretende detectar por primera vez el estado que se puebla por captura electrónica (17.6 MeV).

El análisis llevado a cabo hasta ahora presenta unos resultados muy prometedores puesto que la estadística obtenida para el estado de 16.9 MeV es muy superior a trabajos anteriores y permitirá el estudio en profundidad de las propiedades de este doblete. Además, con los datos obtenidos de eficiencia de detección a bajas energías en el experimento, se ha podido planificar el siguiente experimento que se centrará en la optimización de la detección del protón eyectado del estado 17.6 MeV que tiene una energía de 337 keV.

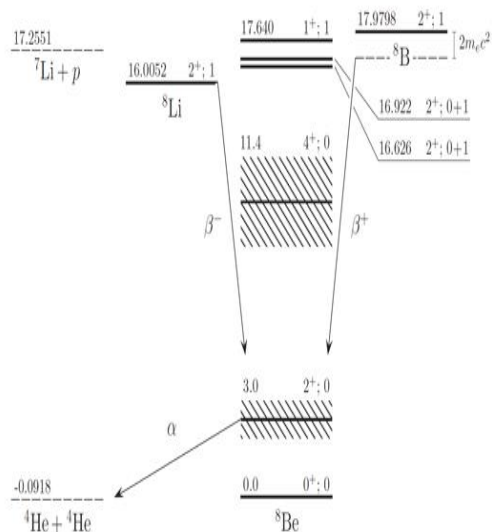


Figura 1: Esquema de niveles de la desintegración del ^8B al ^8Be

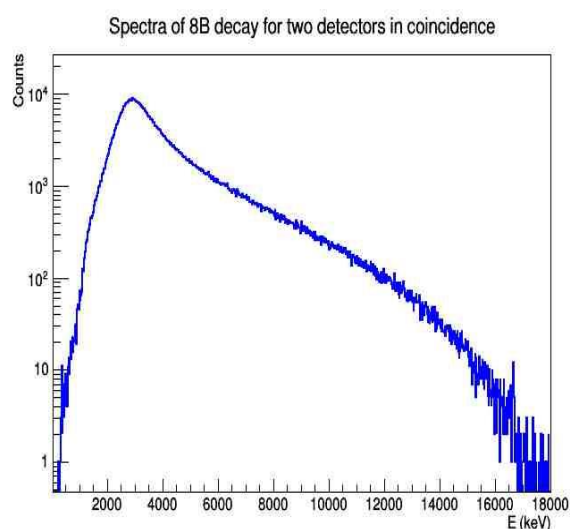


Figura 2: Espectro de desintegración de las dos α emitidas al fragmentarse el núcleo ^8Be debido a la desintegración β del ^8B

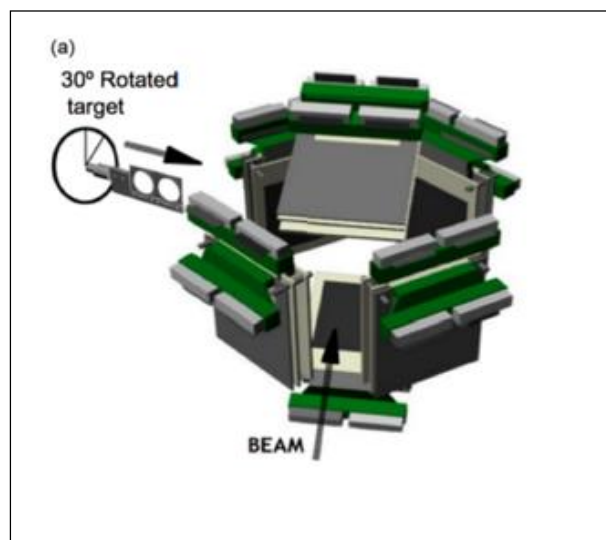
EXPERIMENTO IS619 @ HIE-ISOLDE

(I. Martel, O. Tengblad, MJG Borge, A. Perea, J. Díaz)

El primer estudio dinámico del núcleo con halo ^{15}C a energías cercanas a la barrera de Coulomb fue posible gracias a las últimas mejoras en la línea de HIE-ISOLDE y se llevó a cabo en agosto de 2017. La estructura de halo del ^{15}C es todavía debatida puesto que la energía de ligadura de su último neutrón es 1215 keV. El objetivo de este experimento es determinar la distribución angular de su dispersión elástica, así como la transferencia de neutrones y los canales de ruptura, que se espera que traigan nueva información acerca de sus acoplamientos y de la estructura nuclear del ^{15}C .

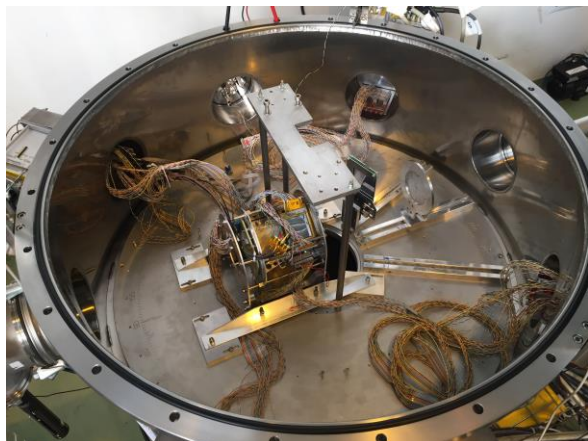
Un haz de ^{15}C a 4.3 MeV/u se hizo impactar con un blanco de ^{208}Pb , alrededor del cual se colocaron 6 detectores de bandas de doble cara de silicio con una cobertura angular de 15 a 165°. El sistema de detección de neutrones en las direcciones delanteras consistió en 30 centelleadores plásticos acoplados a tubos fotomultiplicadores. El análisis de datos está en progreso actualmente, tratando las calibraciones energéticas de los detectores y estudiando simulaciones de Monte Carlo del montaje experimental.

Fig. El setup GLORIA (GLObal Reaction Array) fue el utilizado para el experimento. 6 telescopios de DSSDs tangentes a una esfera de 6 cm de radio se dispusieron en torno al punto de reacción. Los detectores- ΔE de 40 μm estaban respaldados por detectores-E de 1 mm de espesor para asegurar la identificación de isótopos ligeros. Todos los DSSSDs son de 16x16 tiras (un total de 256 píxeles de 3x3 mm²).



EXPERIMENTO IS561B @ HIE-ISOLDE*(O. Tengblad, MJG Borge, E. Nácher, A. Perea, J. Díaz)*

La segunda fase del experimento IS561 se llevó a cabo en octubre de 2017. Su objetivo es poblar estados excitados de ^{11}Li vía reacciones de transferencia (t,p), lo que fue posible gracias a las últimas mejoras en la energía de haz de la instalación HIE-ISOLDE. En la primera fase de 2016 se realizó la reacción (d,p) para estudiar la resonancia del ^{10}Li y, ahora, se espera que los todavía debatidos estados excitados del núcleo con halo ^{11}Li se puedan probar gracias a la detección de partículas cargadas procedentes de la transferencia de nucleones y los neutrones procedentes de los estados excitados poblados.



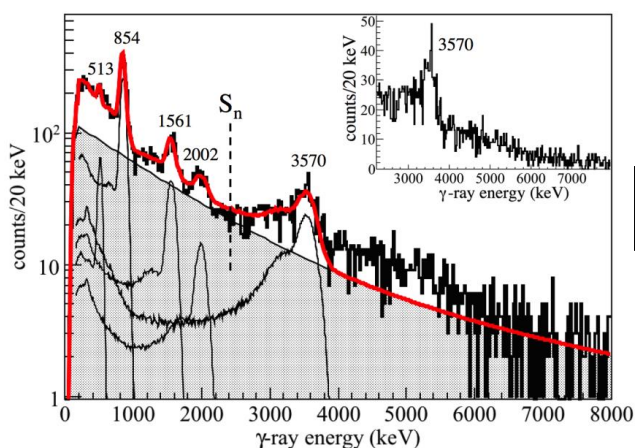
Un haz de ^9Li a 8 MeV/u se utilizó para la reacción junto con un blanco de tritio (sobre un sustrato de Ti), 5 telescopios de DSSDs + PADs cubren ángulos en una configuración pentagonal y 2 telescopios más cubren ángulos hacia atrás. La calibración de los detectores y simulaciones en Geant4 se están llevando a cabo ahora mismo.

Fig. La cámara de vacío SEC empleada en el experimento con el montaje de detectores en su interior. El soporte de los blancos de reacción está en su centro. 5 detectores 16x16 de 60 μm respaldados por PADs de 1 mm cubren un rango angular 45-80° y 2 detectores 32x32 de 60 μm con sus respectivos PADs abarcan 120-150°.

EXPERIMENTO NP1306-RIBF98R1: ESPECTROSCOPÍA GAMMA EN HAZ DE NÚCLEOS EN LA REGIÓN DEL ^{132}Sn @ RIKEN*(Proyecto FPA2014-57196-C5-4-P, estudiante de doctorado FPI2015 Víctor Vaquero, Andrea Jungclaus)*

El principal objetivo de este experimento fue realizar estudios de estructura nuclear para núcleos ricos en neutrones situados en las proximidades del núcleo doblemente mágico ^{132}Sn . Dicho experimento se realizó en el laboratorio RIKEN situado en Tokyo, Japón. Este laboratorio proporciona los haces radiactivos más intenso del mundo producidos a través de la técnica IN-FLIGHT. Una vez que los isótopos de interés fueron producidos, separados e identificados, se estudiaron por medio de espectroscopía en haz usando el espectrómetro DALI2.

El análisis experimental e interpretación teórica de este experimento forma parte de la tesis de Víctor Vaquero. Una parte de los datos han sido ya publicados en mayo del 2017 en la prestigiosa revista Physical Review Letters (V. Vaquero et al. Phys. Rev. Lett. 118, 202502 (2017)). En dicho artículo hemos llevado a cabo el estudio del núcleo ^{133}Sn , el cual consiste en un único neutrón acoplado al núcleo doblemente mágico ^{132}Sn . Además de los conocidos estados de partícula independiente (transiciones a 513, 854, 1561, y 2002 keV), adicionales transiciones gammas han sido observadas por primera vez por encima de la energía de separación de neutrones, alcanzando hasta los 5.5 MeV. Estos estados son interpretados como estados neutrón-hueco y se espera que se desexciten a través de la emisión de neutrones ya que se encuentran situados bastante por encima de la energía de separación de neutrones del ^{133}Sn (2.402 (4) MeV). Sin embargo, la habilidad de la emisión gamma para competir con la desintegración de neutrones es explicada teniendo en cuenta la estructura de los estados inicial y final y la resultante superposición en la función de onda. Nuestro estudio alza la cuestión de si, debido a efectos de estructura nuclear, la emisión gamma quizás juegue un papel mucho más importante que el asumido en la desintegración de altos estados excitados poblados a partir de la desintegración beta en la región sureste del ^{132}Sn .



Espectro gamma corregido Doppler para el ^{133}Sn poblado cuando se elimina un neutrón del ^{134}Sn .

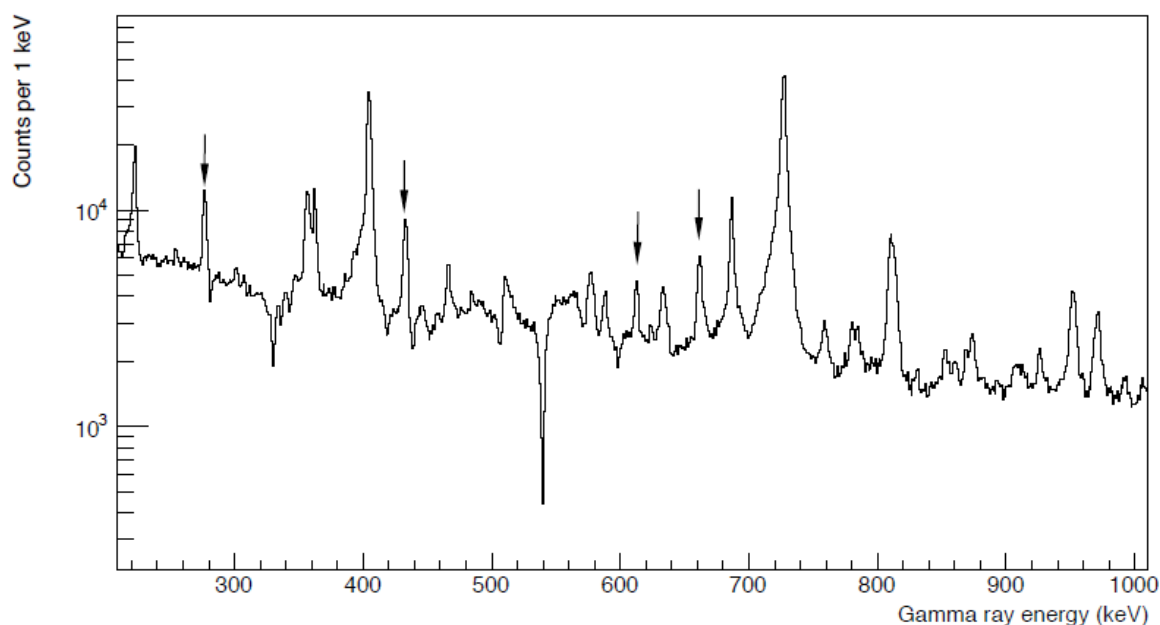
EXPERIMENTO E693: ESTUDIO DE ESTRUCTURAS DE CLÚSTER EN EL ^{212}Po CON AGATA @GANIL

Experimentos recientes de espectroscopía gamma del ^{212}Po apuntan a que no sólo sus propiedades de desintegración alfa son explicables a partir de las intensas correlaciones alfa-cluster entre sus nucleones de valencia; dichas correlaciones serían también responsables de las elevadas probabilidades de transición dipolares eléctricas encontradas entre algunos de sus estados excitados. Con el objetivo de entender mejor la estructura nuclear del ^{212}Po , el experimento E693 se llevó a cabo en mayo de 2017 en las instalaciones del laboratorio de GANIL (Francia). La técnica experimental escogida para el análisis de vidas medias nucleares es el Método de Atenuación por Efecto Doppler (DSAM), cuya sensibilidad para vidas medias cortas se incrementa gracias a la resolución espacial sin precedentes del espectrómetro gamma AGATA.

Los núcleos de ^{212}Po se produjeron mediante la reacción de transferencia alfa $^{12}\text{C} (^{208}\text{Pb}, ^{212}\text{Po}) ^8\text{Be}$ a una energía de 64.7 MeV en centro de masas. El montaje experimental se optimizó en detalle meses antes del experimento y consistió en AGATA en posición nominal junto con un detector segmentado de Silicio (DSSSD). En el experimento se dispuso de 35 cristales de AGATA agrupados en 11 clústers triples junto con un clúster doble, permitiendo la detección de radiación gamma emitida en el rango de ángulos entre $120\text{--}140^\circ$ y 170° con una eficiencia geométrica de aproximadamente 1π . El detector de partículas estaba segmentado en anillos y en sectores radiales, cubriendo ángulos de dispersión entre 25 y 50° en la dirección del haz. Este detector se colocó tras el blanco para detectar las partículas ligeras resultantes de las reacciones, altamente focalizadas hacia adelante, y en particular las 2 partículas alfa resultantes de la desintegración prácticamente inmediato del ^8Be . El detector se protegió de los iones ^{12}C dispersados elásticamente del blanco mediante placas de Tántalo colocadas en frente del mismo.

La elevada segmentación del DSSSD junto con la aplicación de coincidencias temporales entre partículas y gammas permite aplicar condiciones físicas limpias para aislar y estudiar el canal de reacción de interés. Esta ventaja se usará junto con métodos avanzados y altamente configurables de gamma-tracking para la optimización de los datos.

El análisis de los datos está en curso y se enmarca dentro de la tesis de Álvaro Fernández bajo la supervisión de la Dra. Andrea Jungclauss.



Espectro gamma del ^{212}Po . Las transiciones marcadas con una flecha se corresponden con las transiciones más visibles del espectro procedentes del decaimiento de los estados nucleares a más baja energía candidatos a estados alfa-clúster puros.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H_2) es el candidato actual más claro para sustituir a los combustibles fósiles como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H_2 presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H_2 a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. Sin embargo, las limitaciones prácticas imponen una temperatura mínima de 77 K (la del aire líquido) y unas 50 atmósferas de presión máxima. Esto impone unas condiciones

termodinámicas particularmente problemáticas ya que por encima de los 33 K el Hidrógeno molecular es supercrítico, esto es, es imposible condensarlo cualquiera que sea la presión. Sólo mediante un confinamiento extremo, comparable al tamaño molecular, se puede superar esta restricción termodinámica. Durante 2017 hemos aplicado los métodos de cálculo mecano-cuánticos más avanzados al estudio del Deuterio (isótopo del Hidrógeno) molecular confinado en nanotubos de carbono. No es posible hoy por hoy estudiar a este nivel más de tres moléculas interactuantes. Sin embargo, los cálculos nos han permitido avanzar en la comprensión del comportamiento cuántico de estos sistemas. Los cálculos sugieren además que la deslocalización cuántica estabiliza fases confinadas ordenadas con la misma simetría que la del cristal libre que corresponde a una fase de empaquetamiento molecular máximo. Están además de acuerdo con resultados experimentales preliminares actualmente bajo detenido estudio.

En colaboración con el grupo de experimental de Andrey F. Vilesov en la Universidad de Southern California, hemos desarrollado un modelado numérico atómico del proceso de deposición de nanopartículas metálicas en superficies de carbono mediante nanogotas de He superfluido. A partir de este tipo de modelado realista esperamos llegar a entender completamente los procesos posteriores de difusión y agregación de las partículas.

FENOMENOLOGÍA VITREA EN CRISTALES CON MÍNIMO GRADO DE DESORDEN

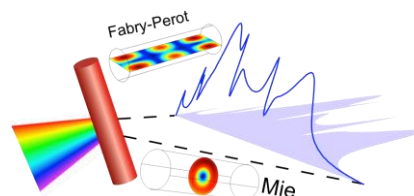
En esta línea se colabora con el grupo del Prof. Josep Tamarit de la Universidad Politécnica de Barcelona. El esfuerzo desde hace algún tiempo se ha centrado en el estudio de sistemas cristalinos los cuales, debido a la presencia de algún tipo de desorden, presentan, al menos en parte, la misma fenomenología que exhiben los medios desordenados en sus propiedades térmicas, mecánicas o dieléctricas a baja temperatura. Tal desorden puede ser de naturaleza estática, generado p. ej. por diferencias en la estadística de distribución de algún sustituyente, o de naturaleza puramente dinámica. El objeto de esta línea de investigación radica en que estos materiales, al presentar un tipo de desorden cuantificable, permiten identificar de forma inequívoca las entidades microscópicas capaces de acoplarse al campo acústico y generar los fenómenos que dan lugar a las anomalías antes mentadas (sistemas de dos niveles, modos “blandos” etc.).

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

Una buena parte del esfuerzo durante el curso se ha centrado en el estudio de la generación y acumulación de radionúclidos resultado de la operación del blanco de Wolframio a instalar en la fuente Europea de Neutrones por Espalación, así como la evolución temporal del inventario radiotóxico residual una vez que el blanco ha cesado su operación. Adicionalmente se han llevado a cabo estudios de daño por radiación en los elementos de generación neutrónica del blanco, así como en elementos estructurales, lo cual ha permitido estimar el tiempo de vida en operación de este elemento.

RESONANCIAS ÓPTICAS TIPO FANO: NANOVARILLAS SEMICONDUCTORAS Y METÁLICAS.

Las resonancias tipo Fano han recibido una enorme atención en plasmónica por sus líneas espectrales muy asimétricas y estrechas. Diversas configuraciones se han considerado en los últimos años, bien basadas en nanoestructuras metálicas muy complejas o en nanopartículas aisladas, en cuyo caso son extremadamente débiles. Investigando precisamente nanopartículas sencillas, el año pasado demostramos la aparición de líneas espectrales tipo Fano muy asimétricas y con un contraste muy fuerte en la luz dispersa por nanohilos semiconductores sencillos, en colaboración con el CICESE (Ensenada, México) a través del proyecto CSIC i-COOP LIGHT NANOFOTOPLAS. Estas predicciones de resonancias Fano podrían ser potencialmente explotadas en nanofotónica y en sensores en IR visible y cercano, con la ventaja de que la fabricación requerida es sencilla en cuanto a forma (nanovarilla) y material (semiconductor). Por otro lado, hemos desarrollado un sensor plasmónico/metálico de bajo coste, rápido y sensible en un área grande en colaboración con el Instituto de Micro y Nano-Tecnologías (CSIC). El sensor está formado por una rejilla de “nanocinturones” de oro fabricada por nanolitografía; se basa en la resonancia plasmónica localizada de tercer orden tipo Fano de los nanocinturones de oro, que aparece en la parte visible del espectro de transmisión (predicha por nuestro grupo hace algunos años). La alta uniformidad y el área del sensor permiten la detección utilizando un sistema óptico simple, que proporciona al dispositivo el potencial de ser utilizado como un sensor portátil, fácil de manejar y desechable.

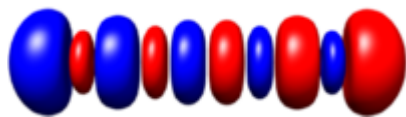


DINÁMICA DE RESONANCIAS PLASMÓNICAS Y DIPOLAR-MAGNÉTICAS

Hemos continuado nuestro trabajo sobre plasmónica, con respecto a las herramientas teóricas y numéricas necesarias para la determinación de las propiedades espectrales de las nanopartículas de forma compleja que exhiben fuertes resonancias de plasmón de superficie localizado (LSP). En particular, nos hemos centrado en una descripción analítica de la dinámica ultrarrápida de resonancias LSP y dipolar-magnética en una nanopartícula (Ag o Si, respectivamente), iluminada por un pulso gaussiano ultracorto (escala de tiempo de fs). Se han encontrado tres posibles escenarios dependiendo de la anchura temporal del campo incidente: duración del pulso mucho más corta, similar y mucho más larga que la duración de la resonancia óptica. La dinámica de las resonancias de nanopartículas puede ser relevante en una gran cantidad de nuevos

fenómenos y aplicaciones en nanofotónica, tales como: interferencia resonante con órdenes multipolares, retraso y conformación temporal de haces a escala de fs inducido por pulsos, generación de armónicos altos, fuentes de pulsos de campo cercano de attosegundos y aceleración de electrones por metasuperficies o nanoestructuras de ingeniería 3D. Trabajo desarrollado en colaboración con el Imperial College (Londres), y financiado por el proyecto MINECO Excelencia LENSBEAM.

PLASMÓNICA CUÁNTICA

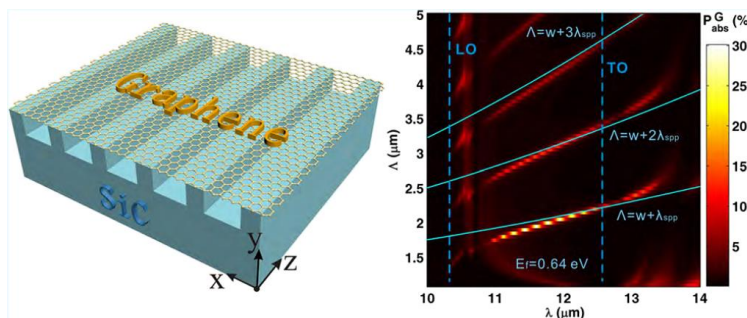


Uno de los objetivos principales de la ciencia moderna es el control preciso de fotones individuales a nivel atómico; la excitación de plasmones permite la localización de energía electromagnética a nivel manométrico y presenta un camino prometedor hacia este objetivo. La plasmónica cuántica es el estudio de la plasmónica en sistemas diminutos en los que el confinamiento de los electrones

de valencia modifica la respuesta óptica. Recientemente ha habido mucho interés en explorar el límite mínimo en tamaño cuando la plasmónica cuántica acaba en el estudio de moléculas. Mediante la manipulación de átomos/moléculas individuales, las propiedades de la luz, como la intensificación del campo local, el gradiente y la polarización, pueden controlarse en la escala de Angstroms. Esto allana el camino para nuevos sistemas de óptica cuántica, así como para la fotoquímica nano-localizada y el diseño de moléculas eficientes para la interacción luz-materia. Nosotros estudiamos modelos teóricos de nanoantenas plasmónicas cuánticas y sus analogías clásicas. También explicamos la importancia de los fonones en la plasmónica cuántica, la generación de electrones calientes y justificamos el concepto de antenas moleculares.

PLASMÓNICA CON GRAFENO

Descubrimos cómo crear cavidades plasmónicas sintonizables en el rango infrarrojo (IR) utilizando películas de grafeno suspendidas sobre una rejilla de carburo de silicio (SiC) y presentamos una investigación numérica, utilizando el método de elementos finitos, sobre las propiedades de absorción y distribuciones de campo de tales estructuras resonantes. Encontramos en



ciertas frecuencias dentro de la banda de reststrahlen del SiC que el sustrato estructurado de SiC actúa como un reflector perfecto, proporcionando un efecto de cavidad que induce plasmones estacionarios en el grafeno. También proporcionamos evidencia clara de fenómenos de acoplamiento fuerte polaritónico entre las resonancias localizadas y los modos de cavidad de plasmón de superficie en el grafeno. Esto se revela por un desplazamiento Rabi en el espectro de absorción. Esto allana el camino para construir estructuras plasmónicas simples, utilizando materiales y técnicas experimentales bien conocidas, que se pueden usar para excitar plasmones de grafeno de manera eficiente, incluso en incidencia normal, así como para explorar electrodinámica cuántica de cavidad y aplicaciones potenciales en espectroscopía IR.

NANOFABRICACIÓN

La fabricación de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas es uno de los objetivos más importantes de nuestro grupo. La interacción de nanopartículas plasmónicas de oro y plata con luz de apropiada longitud de onda genera una alta intensificación de campo eléctrico, lo que puede ser utilizado para detección molecular por Raman o Fluorescencia. Es por ello que durante este periodo se han desarrollado métodos de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y también catalíticas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que dan lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales, dando lugar a la formación de cavidades interpartícula o *nanogaps* altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Se ha prestado una mayor atención a la fabricación de nanoestrellas de plata, ya que presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados por nosotros evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. A lo largo del año 2017

se han mejorado los métodos de fabricación de nanopartículas, profundizando en la caracterización del potencial eléctrico de las superficies.

En colaboración con investigadores del instituto de Óptica, se está llevando a cabo la obtención de superficies nanoestructuradas de Ag y Au obtenidas sobre superficies modificadas mediante procesado láser. Uno de los métodos empleados es el de deposición por láser pulsado (PLD) que da lugar a superficies de altas prestaciones en plasmónica. Se están llevando a cabo estudios conducentes a la optimización de estos procesos de deposición.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas es también una línea importante de investigación y se le ha seguido prestando especial atención durante 2017. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas. Se están empleando ensambladores con cavidades internas o cavitands, como ciclodextrinas funcionalizadas con grupos tioles, que aumentan la adsorción de estos compuestos sobre la superficie. También se están ensayando otro tipo de cavitands de gran interés: los calixarenos. Estos compuestos se fabrican mediante métodos diversos, dando lugar a diferentes estructuras que se están ensayando sobre superficies nanoestructuradas. La síntesis de estos calixarenos se está produciendo en La Universidad de Chile, laboratorio con el cual se tiene una colaboración a través de un proyecto iCOOP.

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

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

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

Se ha avanzado en el estudio de la adsorción de péptidos terapéuticos con nanopartículas plasmónicas. Esta línea de trabajo proyecta la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular, así como la sensibilidad en la detección y biodiagnóstico. Se ha analizado la adsorción de los péptidos octreotido, lanreotido y pasireotido sobre superficies de plata y de oro, estudiándose el mecanismo de interacción de estos fármacos. A tal efecto, se han estudiado moléculas modelo de estos péptidos que contienen las tríadas de aminoácidos capaces de interaccionar con la superficie.

Se ha concluido un estudio consistente en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. Para ello se han empleado muestras llamadas “standard”, por ser las que son accesibles comercialmente y se usan en muchos laboratorios. La funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas se ha empleado con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad, lo que ha permitido aumentar el rendimiento de los sistemas plasmónicos en la detección de sustancias de alta complejidad estructural, debido a la carga negativa existente en estos compuestos naturales. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia).

En colaboración con Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, se está desarrollando una metodología de análisis de huesos basado en la aplicación de la técnica Raman.

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

Se ha avanzado en la línea de investigación dedicada al estudio del Patrimonio. Concretamente en lo que respecta al análisis de colorantes orgánicos de difícil análisis mediante Raman convencional. Dentro de esta línea de trabajo se ha perfeccionado la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser sobre fibras de lana con el fin de realizar un análisis in-situ de colorantes. Esta investigación se está realizando en colaboración con Universidad de Bolonia. El empleo de este tipo de sustratos metálicos es muy interesante para el análisis in situ de pigmentos y tintes de interés artístico, puesto que se pueden preparar directamente en un punto específico del material (fibras, en este caso), además de no dejar ninguna marca evidente en el mismo. Se ha visto que la irradiación a 442 nm da lugar a nanopartículas más versátiles que irradiando a 532 nm. En el primer caso se pueden obtener espectros SERS a varias longitudes de onda (442, 532 y 785 nm), mientras que, en el segundo, solo se pueden llevar a cabo análisis SERS a 532 nm. Las nanopartículas preparadas se han empleado para analizar colorantes sintéticos sobre fibras patrón de lana teñidas y sobre muestras reales.

Las técnicas de fotorreducción in-situ y la simple deposición de nanopartículas con forma de estrella sobre fibras históricas del Patrimonio histórico chileno han permitido detectar la presencia de otras moléculas de origen biológico en aquellas muestras que contenían cochinilla. Este hallazgo permite obtener importante información arqueológica acerca de las prácticas empleadas en los procesos de tinción.

Dentro de esta línea de investigación, se ha comenzado una colaboración con el Departamento de Investigación Científica del Museo Metropolitano de Arte de Nueva York para el estudio de colorantes empleados en grabados japoneses de la época Edo y Meiji. El objetivo de esta investigación es el de analizar la composición de los colorantes, y relacionarlos finalmente con los diferentes procesos históricos vividos en el país nipón durante el siglo XIX. Durante la estancia en el Museo se ha llevado a cabo la extracción del colorante rojo de las hojas del cártamo y su posterior estudio por espectroscopía SERS en diferentes condiciones experimentales (pH, hidrólisis con vapor de HF, etc). Asimismo, se realizaron los mismos experimentos con una muestra de papel japonés preparada por el Prof. Kei Tsuji, obteniéndose resultados similares. Por último, se llevó a cabo el estudio por HPLC de los colorantes de las dos muestras diferentes, identificándose los mismos componentes.

También se ha abierto una línea nueva en colaboración con investigadores de la universidad UCLA de Los Ángeles para aplicación de SERS en el análisis de muestras de interés histórico en el Museo P. Getty de esa ciudad.

Por otra parte, se ha continuado con la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser a partir de una pieza de plata en medio acuoso en colaboración con el grupo de Láseres, Nanoestructuras y Procesado de materiales del Instituto de Química Física Rocasolano (CSIC). Se han repetido los procedimientos de irradiación de plata en las diversas condiciones (longitud de onda láser, tiempo y fluencia de irradiación) con el fin de estudiar la reproducibilidad en la preparación de los coloides de plata. También se ha llevado a cabo la caracterización de dichas nanopartículas por espectroscopía UV-Vis y microscopía TEM, así como el estudio de la efectividad de los soportes SERS preparados. En colaboración con este grupo de investigación se ha llevado a cabo el estudio de la influencia de la longitud de onda en la eliminación láser de líquenes que colonizan materiales pétreos históricos.

Finalmente, se ha estado trabajando en el estudio de materiales de construcción relacionados con el Patrimonio Histórico. El principal componente de los ligantes utilizados en restauración desde el siglo XIX es el silicato cálcico hidratado (C-S-H) cuyas propiedades dependen de su nanoestructura y de su composición, ésta última en términos de relación Ca/Si. Partiendo de reactivos de diferente naturaleza y microestructura se ha determinado el tamaño de las nanopartículas de silicato cálcico hidratado formado, siendo menor si el material inicial es de naturaleza nanométrica, lo que también influye en la morfología de las nanopartículas.

Siguiendo la metodología de síntesis del C-S-H se está explorando la posibilidad de sintetizar AgNPs suportadas en silicato cálcico hidratado. Estos compuestos serían biocompatibles y por lo tanto se estudiará su posible utilización como agentes transportadores de fármacos. Las variables a estudiar son la concentración de Ag, la temperatura y la presencia de aluminio en el silicato cálcico hidratado. Actualmente se ha logrado sintetizar silicato cálcico hidratado con partículas de Ag.

En colaboración con el IETCC se trabaja en la aplicación de Micro-Raman y SERS al estudio de la interacción aditivos/pasta de cemento, lo que permitirá profundizar en los fenómenos de adsorción de los aditivos, variación de la cinética de formación y morfología de los productos de reacción.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física molecular de sistemas astrofísicos, atmósferas y plasmas.
- Espectroscopía de plasmas fríos mediante técnicas radioastronómicas.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Espectroscopía infrarroja de alta resolución de iones moleculares de interés astrofísico.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.
- Estudio y caracterización espectroscópica de filosilicatos.
- Modelización atomística y caracterización experimental de fases secundarias del combustible nuclear gastado.
- Caracterización teórica de fases secundarias de óxidos de uranio formados en condiciones de almacenamiento de combustible nuclear.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y baja presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K.
- Generación de plasmas fríos con descargas de radiofrecuencia en gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía de emisión de plasmas en las regiones visible y milimétrica.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga eléctrica.
- Espectroscopía Raman lineal y estimulada.
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS, SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en los apartados detallados a continuación:

Física molecular de sistemas astrofísicos y atmosféricos

Uno de nuestros objetivos es la generación de hielos similares a los que se encuentran en distintos entornos astrofísicos, como las superficies de granos de polvo del medio interestelar, las superficies frías de objetos lejanos de nuestro sistema solar, o en los núcleos de cometas. Estos hielos están formados mayoritariamente por especies sencillas como H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, y otras especies minoritarias neutras o iónicas, adsorbidas o incluidas. En particular durante el año 2017 nos centramos en el estudio de hielos de hidrocarburos ligeros, CH₄, C₂H₆ y el C₂H₄. En el laboratorio de hielos registramos espectros NIR y MIR de las especies puras y mezclas binarias, a 18 K y 30 K, analizando los cambios

observados en los espectros de las mezclas respecto a los de las especies puras (desplazamientos de frecuencia, cambios de intensidad). Adicionalmente, y en colaboración con el grupo del profesor M. A. Satorre de la Universidad Politécnica de Valencia en Alcoy, con el que tenemos un Proyecto Coordinado del MINECO, hemos obtenido las constantes ópticas de estas especies y las intensidades de absorción en el infrarrojo medio y cercano. En el grupo del Prof. Satorre miden densidades de los hielos generados por fase vapor, utilizando idénticas condiciones de depósito que en el laboratorio del IEM. Por otro lado, en el laboratorio de Alcoy miden el índice de refracción, n_0 , de estos sólidos para la región visible. La densidad es imprescindible para la estimación de las intensidades de absorción IR y el n_0 para obtener las constantes ópticas. Para esto último utilizamos un software propio diseñado para la obtención de las constantes ópticas de un material depositado en capas sobre un sustrato transparente al IR, a partir de sus espectros de IR de transmisión. Este software constituye una herramienta de gran interés por sus aplicaciones en muestras astronómicas. Estos estudios han dado lugar a dos publicaciones en 2017.

La detección de isocianato de metilo (CH_3NCO) en medios astrofísicos ha disparado el interés sobre esta especie. En una colaboración con J.C. Guillemin, de Rennes (Francia) y J. Cernicharo (ICMM, CSIC), hemos registrado y analizado el espectro IR de hielos de esta especie, tanto normal como deuterada, y de mezclas con H_2O , a temperaturas relevantes en astrofísica. Se han obtenido las intensidades de absorción de las distintas bandas del espectro infrarrojo de estos hielos. El estudio se ha completado con cálculos teóricos que han permitido deducir su estructura cristalina, no investigada hasta la fecha. Nuestro trabajo, publicado en 2017, permite predecir que esta molécula forma mezclas estables con agua a esas temperaturas, y recomienda su huella espectral más característica con vistas a su detección en otros medios astrofísicos. Además, las intensidades de absorción proporcionadas permitirían estimar la cantidad de isocianato de metilo presente en los distintos entornos.

Hemos continuado nuestra colaboración con el grupo de los profesores N. Watanabe y A. Kouchi del Institute of Low Temperature Science de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón), financiada con un Proyecto i-link del CSIC. Nuestra primera línea de colaboración ha estado centrada en el estudio de hielos formados por mezclas de CO y H_2O . Nuestra aportación consiste en modelos teóricos para simular las muestras experimentales generadas en los laboratorios de Japón, y tratar de reproducir los espectros de IR que allí han registrado. Este trabajo ha dado lugar a dos publicaciones, en los años 2016 y 2017. Durante 2017 hemos iniciado otros temas de trabajo conjunto. En primer lugar, sobre efectos en el espectro IR de radicales generados por irradiación de hielos amorfos de H_2O y HDO ; también, sobre cálculos de nanopartículas de óxidos de aluminio; y más recientemente, sobre la interacción de superficies de partículas carbonáceas hidrogenadas sobre capas muy finas de hielo amorfo de agua. Estas nuevas líneas de interacción han sido posibles gracias a varias estancias y visitas mutuas, de investigadores del IEM a Sapporo, y de investigadores del ILTS a Madrid y a Granada, donde se celebró una workshop y visita al Observatorio de Calar Alto.

Dentro de la colaboración habitual con el Dr. Pedro Gómez, de la Universidad Complutense de Madrid, a través de la vigente Unidad Asociada en la que estamos incluidos, continuamos trabajando en una línea encaminada a predecir espectros en la zona de IR próximo de sólidos amorfos, como los hielos de mezclas de hidrocarburos con agua. El objetivo es comparar esos espectros con los que se obtienen en misiones astronómicas principalmente en el sistema solar, y, en particular, de la sonda New Horizons de la NASA, que ha permitido obtener unos resultados observacionales espectaculares sobre Plutón y Caronte. Estos cálculos son prolijos, pero los resultados están siendo de gran interés. En el 2017 hemos realizado ya una primera publicación, y esperamos enviar a publicar nuevos resultados en los próximos meses.

Respecto al desarrollo de nuevo equipo experimental, a lo largo de 2017 hemos realizado experimentos preliminares en la cámara de ultraalto vacío, que alcanza presiones residuales de 10^{-10} mbar. Este sistema nos abre un gran abanico de posibilidades, como la simulación de procesos astrofísicos superficiales, o que involucren escalas de tiempo muy largas. En particular se ha comenzado a estudiar la interacción de moléculas de metano sobre superficies de carbono amorfo hidrogenado, que simulan los granos de polvo del medio interestelar.

Se ha continuado con el estudio espectroscópico del aerosol atmosférico descrito como polvo mineral, el cual está compuesto básicamente por filosilicatos tales como esmécticas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio, yeso y aragonito, manteniendo la colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT. Un estudio similar desde el punto de vista técnico se ha comenzado sobre minerales de tipo regolitos, como los que se encuentran en los meteoritos o asteroides del sistema solar, o en la superficie de Marte. En particular se registraron espectros infrarrojos de distintos filosilicatos presentes en entornos astrofísicos, como la montmorillonita, calcita, palagonita y basalto, determinando sus coeficientes de absorción. Este trabajo formó parte de las prácticas de Grado de Alba Suarez. En este proyecto se trabaja con los equipos de Miguel Ángel Satorre (Universidad de Valencia en Alcoy) y de Olga Muñoz (Inst. de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Granada), con quienes compartimos un Proyecto de Redes de Excelencia del MINECO. La coordinación de la red corre a cargo del grupo de Guillermo Muñoz Caro en el CAB, INTA-CSIC.

Generación, procesado y estudio de películas de Carbono Amorfo Hidrogenado

Se han realizado nuevos estudios de formación de compuestos análogos a los del polvo carbonáceo interestelar utilizando plasmas producidos en descargas inductivas de radiofrecuencia con mezclas de He y CH₄. Los depósitos de carbono amorfo hidrogenado (HAC) así formados se han caracterizado mediante espectroscopía infrarroja y se han bombardeado con electrones de 5 keV para simular el efecto de la irradiación con rayos cósmicos. Sobre este efecto existían previamente en la bibliografía dos experimentos discrepantes, basados en bombardeo con haces de iones. En nuestro laboratorio hemos estudiado la caída de la banda de 3.4 μm en función del flujo de electrones a la muestra y el crecimiento de otras bandas de enlaces C=C que demuestran el cambio de composición del material con pérdida de hidrógeno. En estos estudios se han incluido también resultados de densidad de los materiales carbonáceos, de microscopía de emisión de electrones secundarios (SEM) y de reflectividad visible-UV. Un nuevo artículo que recoge varios de estos resultados está en fase de revisión en la revista PSST. Recientemente este tipo de estudios se ha ampliado depositando películas carbonáceas con otros precursores, como C₂H₂, lo que induce espectros IR y propiedades diferentes de los materiales obtenidos, que están en proceso de análisis.

Se han concluido los estudios sobre muestras de carbono amorfo hidrogenado desde un punto de vista teórico, utilizando herramientas como CASTEP, que permiten predecir espectros para distintas estructuras sólidas en función de variables como la densidad, que es crucial y difícil de determinar para polvo astronómico. Los espectros IR calculados para sistemas con distinta proporción de anillos aromáticos y cadenas alifáticas, así como distintas densidades, han sido comparados con los materiales generados en el laboratorio a partir de mezclas de He y CH₄. La comparación sugiere que el polvo interestelar podría tener una estructura formada por pequeños grupos de núcleos aromáticos unidos por cadenas alifáticas, con densidad de 1 g/cm³. Los resultados obtenidos se han recogido en un artículo publicado en el PCCP.

Generación de nanopartículas en plasmas complejos

En el marco de los proyectos Nacionales de Excelencia del MEC vigentes en nuestro grupo durante 2017, y también como parte del proyecto europeo Nanocosmos, hemos producido y caracterizado parcialmente plasmas de distintos gases mediante el reactor de descarga de radiofrecuencias acoplado capacitivamente, diseñado específicamente para la formación y estudio de nanopartículas de interés astrofísico con alto contenido en carbono. Estudios previos de caracterización de las descargas por espectroscopía de emisión óptica, con argón, helio e hidrógeno como gases de llenado, han dado lugar al trabajo fin de máster (TFM) de Magín Parra Serrano. La reciente incorporación de acetileno a los plasmas de helio ha proporcionado los primeros resultados de formación de nanopartículas en el reactor, manifestadas por las imágenes de dispersión por dichas partículas de un haz expandido de radiación láser, recogidas con una cámara CCD.

Espectroscopía de plasmas fríos mediante técnicas radioastronómicas

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, hemos continuado los experimentos de espectroscopía de emisión rotacional en la antena de 40 m del Observatorio Astronómico de Yebes (Guadalajara), con técnicas radioastronómicas de gran sensibilidad y resolución espectral. Para ello, se ha utilizado una célula prototipo de gases a baja presión, en la que se han generado diferentes radicales y nuevas especies moleculares estables partiendo de las precursoras mediante descargas eléctricas de RF acopladas inductivamente y mediante procesos de fotodisociación inducidos por lámparas UV. Los primeros resultados fueron enviados a publicar a la revista Astronomy and Astrophysics y han aparecido ya en versión on-line a final de año. También se han presentado en diferentes congresos nacionales e internacionales. En paralelo, hemos colaborado en el diseño definitivo de una célula de gases de mayor tamaño, en la que se espera generaran con mayor eficiencia y en condiciones más apropiadas nuevos plasmas y procesos de fotodisociación. Dicha célula será instalada en dependencias del Observatorio de Yebes que están requiriendo su acondicionamiento previo, y será utilizada con nuevos radioreceptores de mayor rango espectral construidos en el propio Observatorio durante 2017 y destinados específicamente a este fin.

Diagnóstico de plasmas fríos generados mediante vaporización catódica (sputtering) por espectroscopía de emisión visible

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, hemos colaborado también en la caracterización espectroscópica de los plasmas generados mediante los magnetrones instalados en la máquina Stardust. Esta máquina avanzada y de grandes prestaciones ha sido montada por el equipo del Prof. José Ángel Martín Gago en el ICMM del CSIC con el objetivo de simular experimentalmente la generación de nanopartículas de polvo de distintas composiciones por procesos similares a los que ocurren a nivel interestelar, y hacer un estudio exhaustivo de los mismos. En particular, durante 2017 hemos obtenido y analizado los espectros de emisión óptica de los plasmas generados con blancos de C, Fe y Si, utilizando Ar puro como gas de llenado, o bien añadiendo pequeñas concentraciones de oxígeno al gas para inducir la oxidación de las partículas. Los primeros resultados ya han sido enviados a publicar.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

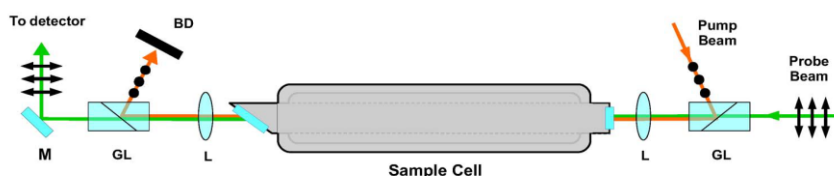
Espectroscopía infrarroja de iones de interés astrofísico

Se han medido 23 líneas de vibración-rotación del ion SiH^+ , en la zona $1902\text{--}2236\text{ cm}^{-1}$. Este ion ha sido identificado en la fotosfera solar, a través de su espectro de absorción visible, sin embargo, no ha sido detectado en el medio interestelar. La información espectroscópica disponible hasta la fecha era muy limitada, y no existía ninguna medida directa de la frecuencia de sus transiciones rotacionales, en principio más adecuadas para su posible identificación en el espacio. Empleando el espectrómetro de diferencia de frecuencias acoplado al reactor de descarga en cátodo hueco, hemos realizado una medida precisa del espectro de vibración-rotación. El análisis de los datos ha permitido hacer predicciones muy fiables de las transiciones rotacionales. Éstas han sido medidas posteriormente en el I. Physicalische Institute en colaboración con Oskar Asvany y Stephan Schlemmer, empleando la técnica de “Laser Induced Inhibition of Complex Growth” en una trampa de iones criogénica. Las medidas, tanto en el IR como en la zona de radiofrecuencias, permitirán realizar búsquedas o identificaciones fiables de este ion en el espacio.

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

La práctica totalidad del trabajo experimental realizado en el año 2017 en el Laboratorio de Espectroscopía Láser ha sido ocupada por el estudio de la molécula de deuterio, tanto en estado puro como formando parte del sistema colisional deuterio-helio, $\text{D}_2\text{-He}$. El interés de dicho sistema colisional reside en que se trata de una pareja molécula-átomo compuesta por un isotópologo de la molécula estable más sencilla y ligera existente y por el átomo inerte más ligero conocido. Esto convierte al par $\text{D}_2\text{-He}$ en un sistema patrón (*benchmark*) para el estudio de colisiones. El análisis de estos sistemas resulta de especial utilidad para el desarrollo y validación de métodos teóricos, ya que su simplicidad permite que los cálculos asociados a dichos métodos puedan llevarse a cabo de forma relativamente rápida, sin el coste computacional que implica el tratamiento de moléculas más pesadas o sistemas colisionales más complejos. Esto permite a su vez una identificación rápida de los problemas o imperfecciones de dichos métodos y un avance más rápido en su mejora y refinamiento.

El estudio experimental de la molécula de D_2 se llevó a cabo en todos los casos utilizando la técnica de espectroscopía Raman estimulada (SRS), convenientemente modificada para la obtención de espectros Raman de rotación pura de la mencionada molécula. La utilización de la técnica SRS para el registro de espectros de rotación pura lleva aparejadas una serie de dificultades asociadas, fundamentalmente, a la baja frecuencia de las líneas espectrales que se desea observar, lo cual requiere que las frecuencias de los dos láseres principales de un experimento SRS, bombeo y prueba, estén muy próximas la una a la otra. Esto a su vez implica una dificultad considerable a la hora de hacer llegar el láser de prueba a los detectores a la vez que se filtra de forma eficaz el láser de bombeo. En nuestro laboratorio el problema se abordó con la utilización de polarizaciones cruzadas en los dos láseres, lo cual requirió modificaciones en los elementos ópticos del espectrómetro. La figura adjunta muestra un breve esquema de la célula de muestra siendo atravesada por los haces de bombeo y prueba con polarizaciones cruzadas y el sistema de prismas utilizado tanto para superponerlos como para realizar una primera separación de los mismos.



Esquema de la célula de muestra y el solapamiento y separación de los haces de bombeo y prueba en un experimento SRS con polarizaciones cruzadas.

El sistema colisional $\text{D}_2\text{-He}$ se estudió de forma sistemática a tres temperaturas diferentes, 77, 195 y 300 K, y en un intervalo de presiones de entre 100 y 1200 mbar aproximadamente. Los perfiles espectrales obtenidos para las líneas rotacionales se analizaron ajustándolos a perfiles de Voigt, que reproducen de manera muy satisfactoria la forma de estas líneas en el rango de presiones de referencia. El análisis tanto de las anchuras colisionales obtenidas como de las frecuencias de los máximos de las líneas frente a la presión parcial del átomo colisionante (He) permitió la obtención de valores numéricos para los coeficientes de ensanchamiento (γ) y desplazamiento (δ) colisional de las líneas en la molécula de deuterio.

Los valores resultantes se han comparado con los obtenidos, mediante cálculos *ab initio* de dispersión cuántica (*quantum scattering*) particularizados al sistema $\text{D}_2\text{-He}$, por los profesores F. Thibault (universidad de Rennes) y P. Wcislo (Universidad de Torun). El acuerdo teoría-experimento es excelente y los resultados se han enviado para su publicación en el *Journal of Raman Spectroscopy*.

Además del sistema colisional D_2 -He, también se han realizado medidas de frecuencia de las líneas rotacionales del deuterio puro a baja presión con objeto de mejorar los valores disponibles hasta el momento en la bibliografía. Los resultados obtenidos presentan una precisión aproximadamente un orden de magnitud superior a la de los mejores valores bibliográficos, por lo que se está preparando una comunicación para su publicación en los próximos meses.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

El grupo de Fluidodinámica Molecular es un grupo experimental pionero en el estudio cuantitativo de los flujos de fluidos fuera del equilibrio. El laboratorio cuenta con dos instalaciones de diagnóstico de chorros de gases y líquidos mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinticinco años. Durante 2017 se ha continuado con el estudio de estos flujos tratando de enlazar la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, con 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. 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. Los chorros de líquidos subenfriados son un medio ideal para estudiar experimentalmente la solidificación homogénea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas.

Se han realizado numerosos experimentos de expansiones supersónicas de H_2 y D_2 puros, con el fin de obtener datos precisos de densidades y poblaciones rotacionales. Para ello ha sido necesario calibrar cuidadosamente la sensibilidad de las columnas de los detectores CCD de los espectrómetros, porque la falta de uniformidad condiciona la precisión última de las medidas. Con estos nuevos datos, ya corregidos, ha sido posible reconstruir la evolución gasdinámica del jet hasta el interior de la tobera en función de las colisiones moleculares.

Por otra parte, se han realizado nuevos experimentos de expansiones de mezclas de D_2 natural con H_2 y He, en distintas proporciones, y de orto- D_2 al 10% en He, con el fin de estudiar la cinética de relajación rotacional del H_2 y D_2 mediante colisiones inelásticas entre ellos, así como la relajación rotacional del D_2 por colisiones con átomos de He. Estas medidas están en fase de análisis, aplicando los nuevos protocolos de calibrado de sensibilidad puestos a punto en las expansiones de H_2 .

En cuanto al desarrollo metodológico, se ha reformulado la ecuación de Boltzmann generalizada para su empleo en jets supersónicos, dando lugar a una ecuación maestra mucho más manejable que las versiones anteriores. En esta nueva formulación, completamente rigurosa se pone de manifiesto de forma natural cuales son las variables que realmente gobiernan la expansión supersónica. Entre otras muchas ventajas pone de manifiesto que el concepto de temperatura rotacional convencional no es riguroso, y debe ser sustituido por varias temperaturas rotacionales, una por cada estado excitado con suficiente población. La formulación permite factorizar el efecto de las colisiones y del baño térmico dando lugar a una imagen mucho más clara de la jerarquía de los eventos colisionales concurrentes. Pone también de manifiesto la importancia fundamental de las distintas roturas de equilibrio entre los grados de libertad rotacionales y traslacionales, así como el cambio de comportamiento, extremadamente no-lineal en la zona inicial de la expansión, y prácticamente lineal a distancias superiores a un diámetro de tobera. Gracias a este desarrollo se está logrando la determinación experimental de tasas colisionales inelásticas nivel-a-nivel del hidrogeno molecular con una precisión sin precedentes (~ 3 -4 %), cubriendo un amplio rango térmico (270 a 40 K) en un único experimento.

Por último, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania), se ha completado un estudio, iniciado en nuestro laboratorio en 2014, sobre la cristalización del agua líquida subenfriada. Inyectando microgotas de agua líquida en el vacío éstas se enfrían muy rápidamente por evaporación superficial, alcanzando temperaturas mínimas de 230,6 K antes de cristalizar en hielo. Para saber si las microgotas seguían siendo líquidas o sólidas, se iluminaron con un láser y se analizó el espectro del scattering inelástico (Raman). A partir de unos picos resonantes se ha conseguido seguir con gran precisión la disminución del tamaño de las microgotas, y determinar su temperatura. Estos experimentos permitirán ahondar en el conocimiento de las propiedades anómalas del agua, que afectan al clima y a la preservación de la vida en la Tierra.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Mecanismos de formación de moléculas simples en el medio interestelar catalizadas por superficies de silicatos

Durante el año 2017 se ha puesto en marcha una colaboración entre investigadores de diferentes grupos nacionales e internacionales, a saber A. Rimola de la Universidad Autónoma de Barcelona y J. Kästner de la Universidad de Stuttgart. Como primer proyecto de dicha colaboración, se ha estudiado la formación de agua en dos pasos sucesivos ($H + O \rightarrow OH$, $OH + H \rightarrow H_2O$) sobre la superficie (010) de forsterita, un mineral conocido por estar presente en forma cristalina

en el medio interestelar. El estudio de la reacción se realiza haciendo uso de las herramientas computacionales previamente indicadas, con especial énfasis en los códigos Gaussian, CRYSTAL y CP2K, además del uso de rutinas propias.

La formación de agua en esta superficie es muy exotérmica y la velocidad de la reacción está principalmente gobernada por las barreras de difusión encontradas durante el movimiento de los átomos de hidrógeno sobre la mencionada superficie. Dicho átomo puede ser atrapado en pozos en la superficie de energía potencial representando estados fisisorbidos o quimisorbidos. A las temperaturas características del medio interestelar, la difusión queda impedida tan pronto como se produce una quemisorción y por lo tanto la reacción queda inhibida. La única posibilidad en este caso es incorporar efectos de tunneling cuántico que permitan al átomo de hidrógeno sobrepasar el pozo de potencial aumentando la viabilidad del mecanismo.

Dentro de esta línea de investigación, se está generalizando el estudio sobre forsterita a superficies de olivina genérica, como primer paso para considerar superficies amorfizadas, mucho más abundantes en entornos astrofísicos.

Los resultados de esta línea están actualmente en proceso de publicación y se esperan en torno a dos trabajos publicados para final de año.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Hemos abordado, en colaboración con F. J. Aoiz de la UCM y V Sáez Rábanos de la UPM, el estudio de la reactividad en la región dominada por “tunneling” (i.e. a energías de colisión por debajo del umbral clásico de reacción) para dos sistemas prototípicos: $O(^3P) + H_2$ y $F + HD$. En la reacción $O(^3P) + H_2$ nos hemos centrado en la correlación entre las superficies de potencial relevantes y el desdoblamiento Λ en los productos OH. En la reacción $F + HD$ investigamos las características de una resonancia dinámica ligada a la excitación vibracional de HD que aparece a muy baja energía de colisión ($\sim 5 \times 10^{-3}$ eV) pero por encima del régimen ultrafrío que lleva al límite de Wigner.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular. Gases Cuánticos Ultrafríos

Se ha continuado el estudio de control de transporte en un gas cuántico de átomos o moléculas en presencia de interacción. El método propuesto utiliza un potencial externo periódico dependiente del tiempo que rompe la simetría espacial, pero conserva la simetría temporal, junto a la modulación del parámetro de interacción mediante pulsos de control. En ausencia de interacción, la corriente promedio inducida en el sistema es asintóticamente cero debido a restricciones de simetría. Sin embargo, nuestro trabajo previo demuestra que los parámetros del sistema pueden ser ajustados de forma que la corriente muestra oscilaciones regulares de gran amplitud, cuyo periodo es fácilmente controlable en un rango temporal amplio. En presencia de interacción estas oscilaciones regulares sólo son posibles si la relación entre la amplitud del potencial externo y el parámetro de interacción se mantienen dentro de unos límites. Fuera de estos límites, una interacción muy alta destruye la regularidad de las oscilaciones y el potencial externo es incapaz de modificar la corriente. El control del parámetro de interacción permite iniciar o bloquear el proceso de transporte en un gas ultrafrío de un modo muy preciso, pudiendo generar y controlar una corriente asintótica, cuya amplitud y sentido pueden ser modificados aplicando sucesivos pulsos de control. Durante este año se han analizado las condiciones que optimizan la corriente y permiten su control. Dado que el problema es fuertemente no lineal, la corriente del sistema exhibe un rango muy amplio de comportamientos en función de los parámetros, incluyendo desde la creación de corriente estable a oscilaciones muy irregulares.

Caracterización teórica de fases secundarias de óxidos de uranio formados en condiciones de almacenamiento de combustible nuclear

Esta sub-línea de investigación comenzó después del primer contacto con los miembros de la Unidad de Residuos Radiactivos de Alta Actividad del CIEMAT, donde la investigación que involucra el proceso de oxidación-hidratación del dióxido de uranio y lleva al estudio de la formación de fases secundarias en la superficie del combustible nuclear gastado. Investigación que estaba siendo estudiada mediante métodos experimentales, principalmente difracción de Rayos X y espectroscopia Raman en el CIEMAT y donde nosotros en el IEM fuimos invitados a aplicar la metodología teórica a la investigación en estas líneas en la parte cristalográfica y de espectroscopia Infrarroja y Raman.

Caracterización de estructuras que fue abordado mediante la computación de las estructuras cristalinas de los materiales correspondientes usando pseudopotenciales ultrasoft (US), que no son conservadores de la norma donde debido a las dificultades que encontramos se generó desde el inicio un nuevo pseudopotencial conservador de la norma, pseudopotencial tipo GGA-PBE relativista conservador de la norma válido para la determinación de espectros vibracionales dentro del programa CASTEP. El pseudopotencial fue validado mediante el cálculo de las estructuras de una gran cantidad de fases secundarias y el espectro Raman del mineral carbonato de uranio ruderfordina. Los resultados fueron excelentes y fueron publicados en la revista Physical Chemistry Chemical Physics a finales de 2016.

El primer mineral estudiado fue la ruderfordina donde los difractogramas de Rayos X y espectros Raman asociados a ambas estructuras fueron extraordinariamente similares. E igualmente la presencia de bandas correspondientes a moléculas de agua en el espectro Raman requería el estudio de la introducción de agua en la estructura, donde se observó que existían algunas bandas en el espectro Raman experimental que no aparecían en el espectro calculado teóricamente. Estas bandas, por tanto, debían ser debidas a que la muestra natural estudiada era una mezcla de minerales. Se verificó que estas bandas extra eran debidas a la presencia de trazas de los minerales schoepita y uranofana.

Tras este trabajo, se llevó a cabo el estudio del peróxido de uranilo studtita. Material que fue sintetizado en CIEMAT, en donde se estaba estudiando su estabilidad térmica mediante espectroscopia Raman in situ donde en la modelización se utilizó el funcional PBE junto con la corrección empírica de Grimme. De lo cual resultaron en estructuras muy bien convergidas con respecto a los parámetros de cálculo y con muy buen acuerdo con la geometría y patrón de Rayos X experimentales. Por ello, se abordó la determinación teórica del espectro Raman y se asignaron todas las bandas del espectro experimental por primera vez. La asignación de la banda correspondiente a la vibración de estrechamiento simétrica UO y el análisis experimental de su desplazamiento con la temperatura permitieron estudiar la estabilidad térmica de la studtita en presencia y ausencia de agua. El estudio combinado teórico-experimental fue publicado en la revista *Spectrochimica Acta A*.

Tras esto, se abordó el estudio teórico de las propiedades termodinámicas de estos óxidos de uranio, por ello se caracterizaron las propiedades termodinámicas y mecánicas y la ecuación de estado del carbonato de uranilo o ruderfordina, resultados que fueron publicados en *Journal of Physical Chemistry C*. Resultados que demostraron que la estructura cristalina de la ruderfordina era mecánica y dinámicamente estable, y se hicieron predicciones de un largo número de propiedades mecánicas para las que no existían mediciones experimentales. Recientemente se ha hecho lo mismo con el mineral silicato de uranilo soddyita del que ha resultado un artículo publicado en el *Journal of Solid State Chemistry*. Se ha encontrado que los métodos teóricos tienen una gran potencia predictiva en la investigación de materiales que contienen el átomo de uranio. Esto se ha encontrado no solo para las fases secundarias resultantes de la oxidación-hidratación del combustible nuclear gastado, sino también para óxidos de uranio anhidros como el UO₃. Los resultados obtenidos para las propiedades estructurales, termodinámicas, la ecuación de estado y el espectro Raman del polimorfo γ del trióxido de uranio fueron publicados en el *Journal of Physical Chemistry C*. Los resultados estructurales y espectroscópicos están en un acuerdo excelente con la información experimental. De esta manera se ha resuelto la incertidumbre casi total en la asignación de su espectro Raman ya que se han asignado todas las bandas de este espectro. Finalmente se ha encontrado un excelente acuerdo con las propiedades termodinámicas obtenidas experimentalmente tanto a baja como a alta temperatura, y se han predicho los valores del módulo de elasticidad y sus derivadas.

El estudio del oxi-hidróxido schoepita, una componente fundamental de la secuencia paragenética de alteración de la uraninita y el combustible nuclear gastado, está en fase de redacción para enviarlo a la revista *Inorganic Chemistry*. Este último material es muy complejo y los cálculos son extremadamente caros. Similarmente, los resultados obtenidos las propiedades termodinámicas fundamentales de seis de las más importantes fases secundarias del combustible nuclear gastado (dehydrated schoepite, metastudtite, studtite, soddyite, rutherfordine) han sido usados recientemente para determinar las entalpías y energías libres de un gran número de reacciones que involucran a estos materiales y para estudiar la estabilidad termodinámica relativa de estas fases bajo condiciones de almacenamiento geológico definitivo. Los resultados de estos estudios han sido incluidos en dos artículos que han sido escritos y enviados para su publicación en *Journal of Physical Chemistry C*.

Por último, la línea de investigación viene trabajando en los procesos que involucra la oxidación del dióxido de uranio en condiciones secas. Ya se ha estudiado el sistema γ -UO₃, estando los resultados en excelente acuerdo con los datos experimentales y se están llevado a cabo estudios con las otras formas polimórficas del UO₃.

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- 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 precristalización, 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 de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

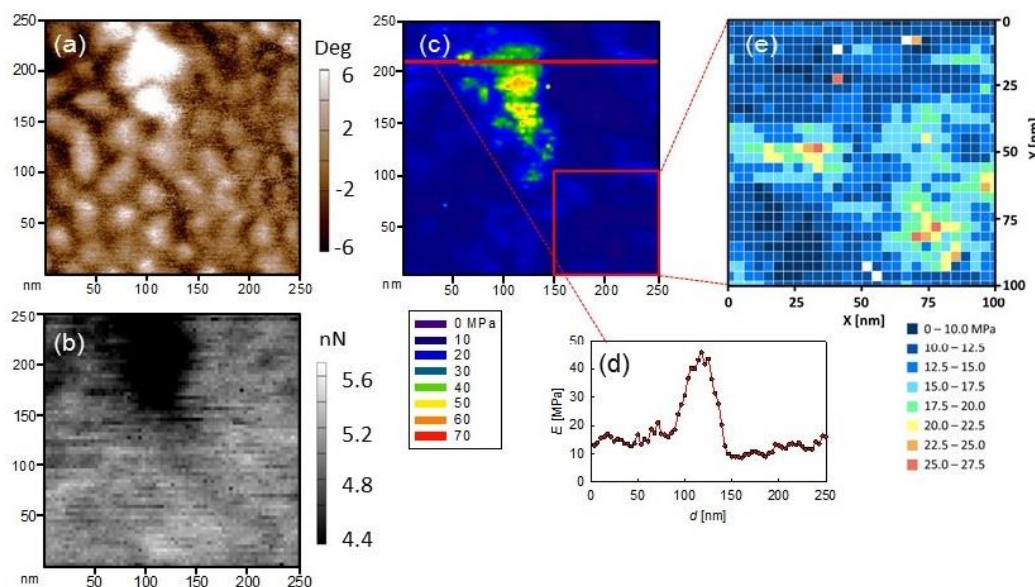
LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE NANOCOMPUESTOS DE POLIPROPILENO REFORZADOS CON GRAFENO .

El objetivo de este trabajo, llevado a cabo en colaboración con el Grupo de la Prof. M.A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), ha sido el desarrollo de nuevos nanocompuestos basados en polipropileno y grafeno con aplicaciones potenciales en el sector del transporte. Partiendo de un grafeno comercial, éste fue convenientemente modificado con una serie de cadenas cortas de polipropileno e incorporado en pequeñas cantidades a una matriz de polipropileno. De esta manera se obtuvieron materiales conductores que presentan una mejora en sus propiedades mecánicas. Se ha constatado que la funcionalización del grafeno incrementa la estabilidad térmica, la conductividad eléctrica y las prestaciones mecánicas de los nanocompuestos. El mecanismo de refuerzo ha sido investigado a diferentes escalas utilizando las técnicas de nanoindentación y espectroscopía Raman y mediante ensayos de tracción. Por otra parte, se ha encontrado que los cambios estructurales, que tienen lugar en la matriz polimérica como consecuencia de la incorporación del grafeno, no modifican de manera apreciable las propiedades. Por ello, el incremento mecánico observado se ha interpretado a la luz de las propiedades intrínsecas del grafeno y de su interacción con la matriz que le hospeda. Otro factor relevante sobre el refuerzo es la orientación del grafeno que ocurre cuando el nanocompuesto es sometido a un campo de tensiones y deformaciones. Esto resulta especialmente significativo en el caso de grafeno funcionalizado.

NANOINDENTACIÓN MEDIANTE AFM EN ELASTÓMEROS CONDUCTORES.



Medidas de nanoindentación con AFM en un nanocompuesto de poli(estireno-b-etileno-co-butileno-b-etireno) (SEBS) con un 2.1 vol% de grafeno modificado con una serie de cadenas cortas de poliestireno: (a) Imagen de fase, (b) Mapa de adhesión, (c) Mapa de valores de módulo E, (d) Perfil de valores de E a lo largo de la línea roja en (c), (e) Mapa de E de la región delimitada por un cuadrado en (c).

El trabajo experimental de este estudio se ha llevado a cabo en colaboración con el grupo del Prof. Holger Schönherr en la Universidad de Siegen (Alemania). El objetivo del trabajo se centra en comprender el comportamiento nanomecánico de una serie de nanocompuestos formados por poli(estireno-b-etileno-co-butileno-b-etireno) (SEBS) y pequeñas cantidades de grafeno.

El SEBS es un copolímero tribloque con propiedades elastoméricas, y sus bloques de etileno y de estireno se segregan para formar dominios morfológicos. El poliestireno, en el caso del SEBS del presente estudio, forma un conjunto de cilindros inmersos en una matriz etilénica. Cuando se añade grafeno al SEBS por encima de una determinada cantidad (alrededor de 1 vol.%), el nanocompuesto muestra unos niveles muy aceptables de conductividad eléctrica y, por tanto, representa un material de gran interés en el área de la electromecánica. El grafeno se ha funcionalizado con cadenas cortas de etileno o estireno, con el objetivo de que interaccione alternativamente con cada uno de los bloques de la matriz de SEBS. De esta manera, se pretende optimizar la dispersión del grafeno en la matriz, al mismo tiempo que se controlan y mejoran las propiedades finales del nanocompuesto.

El estudio de las propiedades nanomecánicas de los nanocompuestos de SEBS/grafeno es una ruta necesaria para el esclarecimiento de sus propiedades macroscópicas. Utilizando penetraciones de huella de tan solo unos pocos nanómetros,

mediante nanoindentación por AFM, se han podido dilucidar las propiedades mecánicas características de los cilindros de poliestireno (de ≈ 20 nm de diámetro), de los bloques etilénicos circundantes, y del grafeno, tal y como se muestra en la figura. Los mapas de módulo elástico generados para cada nanocompuesto, con distinto tipo y cantidad de grafeno, han sido analizados estadísticamente y, finalmente, se ha obtenido un perfil de distribución de valores de módulo correspondiente a cada material. Los resultados muestran una distribución simétrica para el SEBS, y asimétrica para los nanocompuestos, con una asimetría característica para cada uno de ellos, que puede correlacionarse con la morfología desarrollada por la interacción con las láminas de grafeno.

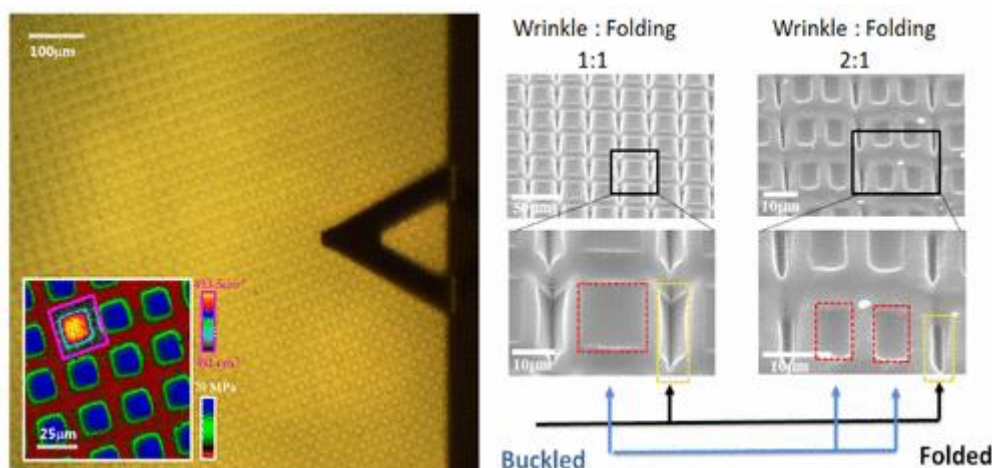
Grupo de DINÁMICA Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA (SOFTMATPOL)

NUEVAS PROPIEDADES DE TIPO FERROELÉCTRICO EN DIFLUORURO DE POLIVINILIDENO EN CONDICIONES DE CONFINAMIENTO.

Se ha continuado estudiando el cambio de propiedades en polímeros debido a su confinamiento, en colaboración con el Dr. Jaime Martín del Imperial College, London. En concreto, hemos estudiado cómo el confinamiento cilíndrico afecta a la estructura y la relajación del difluoruro de polivinilideno (PVDF) y cómo estos a su vez afectan el comportamiento para - ferroeléctrico de este polímero. Se prepararon nanotubos de PVDF a partir del fundido, que se solidificaron en plantillas de óxido de aluminio anódico (AAO). Mediante espectroscopía dieléctrica se observó un proceso de relajación bimodal en estos nanotubos de PVDF: además de la relajación α que se observa en el sistema sin confinar, detectamos una relajación notablemente más lenta, asociada con las regiones de PVDF de dinámica restringida en la interfaz con el poro AAO. A través del comportamiento de esta nueva relajación se detectó el comportamiento de tipo 'relaxor ferroeléctric'. De este estudio se concluye que los nanotubos de PVDF contienen nanodominios de tipo ferroeléctrico en las regiones de fase amorfa adyacentes a la interfaz AAO. Estos nanodominios ferroeléctricos son debidos a una conformación de cadena anisotrópica y una orientación preferida de dipolos locales. Tal comportamiento de relajación-ferroeléctrico no se ha observado para el homopolímero de PVDF no irradiado; Por lo tanto, nuestros hallazgos pueden permitir en el futuro aplicaciones alternativas para este plástico, por ejemplo, para la producción de dispositivos electrocalóricos para refrigeración de estado sólido que se benefician de una respuesta de tipo relaxor-ferroeléctrico.

PREPARACIÓN DE PELICULAS MICROESTRUCTURADAS CON MODULACIÓN QUÍMICA.

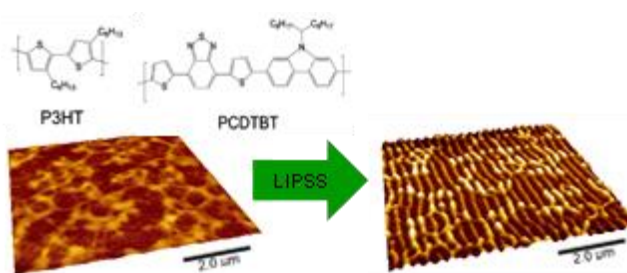
En colaboración con el doctor Juan Rodríguez Hernández (ICTP-CSIC) se ha iniciado una línea destinada a producir superficies elásticas microestructuradas con dimensiones controladas de forma precisa y distribución química, a través de la generación de arrugas. Para tal fin, se utiliza el preestiramiento y subsecuente oxidación de áreas seleccionadas de sustratos PDMS elásticos. Cuando se realiza el estiramiento y oxidación sin máscara, obtenemos una superficie químicamente continua, con una topografía sinusoidal. Al usar máscaras para seleccionar áreas de tamaño micrométrico donde se produce la oxidación, la topografía es mucho más compleja, alternando líneas de arrugas plegadas (valles) y áreas de baja deformación (colinas). Se observa que las características de arrugas, incluyendo el período y la amplitud, exhiben una relación directa con las dimensiones de los patrones presentes en la máscara y con las condiciones de preestiramiento.



SINERGIA EN LA NANOESTRUCTURACIÓN MEDIANTE LÁSER EN MEZCLAS DE POLÍMEROS SEMICONDUCTORES.

En colaboración con el grupo de la Dra. M. Castillejo y Dra. E. Rebollar (IQFR-CSIC) hemos demostrado la viabilidad de fabricar nanoestructuras superficiales periódicas (LIPSS) en la mezcla P3HT / PCDTBT (1: 1), que puede considerarse como un modelo de heterounión para las células solares de polímero. A pesar de la rugosidad heterogénea, debido a la separación de fases en la mezcla, ambos dominios de P3HT y PCDTBT presentan un LIPSS bien definido, así como una sinergia para ambos componentes en la mezcla cuando se irradian a longitudes de onda de 532 y 266 nm. Ambos, P3HT y PCDTBT en la mezcla requieren una fluencia y número de pulsos menores para optimizar la morfología de LIPSS que

en el caso de la irradiación de los homopolímeros por separado. La espectroscopía de absorción de rayos X y la espectroscopía Raman revelan una buena estabilidad química de ambos componentes en las películas delgadas de la mezcla durante la formación de LIPSS. Además, la microscopía de rayos X de barrido muestra que los mecanismos de formación de LIPSS no inducen una segregación de fase adicional ni una mezcla de los componentes. La microscopía de fuerza atómica revela una conductividad eléctrica heterogénea para el homopolímero irradiado y para las películas delgadas de mezcla, que muestra una conducción eléctrica más alta en los valles que en la cresta del LIPSS.



MATERIALES POLIMÉRICOS OBTENIDOS A PARTIR DE: A) PTT y PTT-PTMO CON NANOADITIVOS DE DIFERENTE NATURALEZA Y B) RECURSOS DE ORIGEN BIOLÓGICO.

Se han preparado nanocompuestos poliméricos basados en poli(trimetilén tereftalato) (PTT) y sus copolímeros con poli(óxido de tetrametileno) (PTT-PTMO) con diferentes nanoaditivos como: nanotubos de carbono de pared simple y múltiple (SWCNT y MWCNT, respectivamente), grafito expandido (EG), carburo de silicio (SiC) y sulfuro de wolframio IV (SW₂), determinándose sus propiedades físicas, mecánicas, térmicas y eléctricas. De su estudio se ha podido inferir el interés que algunos de estos materiales presentan debido a la combinación de buena conducción eléctrica y transmisión óptica. Asimismo, se está llevando a cabo un estudio en materiales con elevado potencial biodegradable como son los poliésteres aromáticos basados en el ácido 2,5-furano-dicarboxílico y los poliésteres alifáticos obtenidos a partir del ácido 1,4-ciclohexano-dicarboxílico.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

EXPERIMENTOS Y SIMULACIONES MULTIESCALARES DE LAS PROPIEDADES MOLECULARES E HIDRODINÁMICAS DEL DOMINIO EXTRACELULAR DEL RECEPTOR DE FACTOR DE CRECIMIENTO EPITELIAL HUMANO HER2 Y SU HOMODÍMERO.

En una amplia variedad de carcinomas, la amplificación de determinados genes conduce a la sobreexpresión de HER2, que puede causar la espontánea dimerización y activación en ausencia de ligando. Esto ha hecho HER2 especialmente atractivo como diana terapéutica. En este contexto, el mecanismo molecular de la homodimerización de HER2 sigue siendo esquivo. De hecho, se ha reportado repetidamente que el homodímero de HER2 "back-to-back" no se forma en solución. No obstante, recientemente la estructura cristalina del homodímero del dominio extracelular de HER2 como una interacción "back-to-head" ha sido resuelta.

Experimentos, simulaciones de dinámica molecular y modelización hidrodinámica han sido utilizados para obtener las propiedades de transporte del dominio extracelular de HER2 en solución. La viscosidad intrínseca y el coeficiente de difusión del monómero y homodímero del dominio extracelular de HER2 fueron evaluados.

Hemos detectado una cierta cantidad de homodímero del dominio extracelular de HER2 en solución. La combinación de experimentos y simulaciones de propiedades hidrodinámicas muestra un alto grado de flexibilidad molecular en ambos sistemas, que en última instancia conduce a valores bastante más altos de la viscosidad intrínseca y valores más bajos de coeficiente de difusión que los correspondientes a proteínas globulares de masa molecular similar. Esta alta flexibilidad obedece a la conformación abierta de este receptor específico y a las fluctuaciones de los diferentes dominios, especialmente el dominio IV debido a su movimiento de bisagra. Además, reportamos que para obtener los valores correctos de los parámetros hidrodinámicos desde la modelación, se debe tener en cuenta la glicosilación de los sistemas. Las características conformacionales de los receptores de factor de crecimiento epidérmico regulan sus propiedades hidrodinámicas y también controlan su actividad. Por lo tanto, es fundamental para comprender la dinámica de estos sistemas y el papel de los dominios específicos involucrados. La obtención de una correlación entre la dinámica del receptor y propiedades de transporte macroscópico es altamente deseable.

PROPIEDADES TERMO-FÍSICAS DE UNA SERIE ANÁLOGA DE LÍQUIDOS IÓNICOS BASADOS EN TETRACIANOBORATO.

Las propiedades termo-físicas de líquidos iónicos (IL) de baja viscosidad basados en el anión tetracianoborato ($[B(CN)_4]^-$) junto con una serie homóloga de cationes 1-alkil-3-metilimidazolium $[EMIM]^+$ (etil), $[BMIM]^+$ (butil), $[HMIM]^+$ (hexil), $[OMIM]^+$ (octil), y $[DMIM]^+$ (decil) fueron investigadas por métodos experimentales y simulaciones de dinámica molecular (MD) en condiciones de presión atmosférica y varias temperaturas. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con la Universidad de Erlangen-Nuremberg y el Centro Nacional de Investigación Científica "Demokritos". Se aplicaron métodos espectroscópicos basados en resonancia magnética nuclear y dispersión de luz superficial para medir tanto los coeficientes de auto-difusión de iones como la viscosidad dinámica. En cuanto a las simulaciones MD, se

estudió la transferibilidad de un modelo molecular no polarizable, desarrollado para el compuesto [EMIM][B(CN)₄] por optimización a datos experimentales, a las otras IL homólogas. Para ello la descripción de las interacciones inter e intramoleculares, se utilizaron campos de fuerza precisos y aproximados (FF) con respecto a su transferibilidad dentro de la serie homóloga de IL, con el objetivo de reducir el esfuerzo computacional en las simulaciones. Los resultados obtenidos en la simulación muestran un buen acuerdo con los datos experimentales a lo largo de toda la serie IL homóloga basadas en [B(CN)₄]⁻, esto indica una buena transferibilidad del FF. De hecho, solo se observaron desviaciones a las temperaturas más bajas. Esta observación sugiere que las cargas asociadas con IL conteniendo cationes con una cadena alquílica corta son transferibles a homólogos de cadena larga sin una pérdida significativa de precisión. Las simulaciones muestran que al aumentar la longitud de la cadena de alquílica en el catión se ha observado una gradual nano-segregación, así como una correlación entre la auto-difusión y la viscosidad, de acuerdo con los resultados encontrados en la literatura.

SUPERNUCLEACIÓN Y PLASTIFICACIÓN EN LA CRISTALIZACIÓN Y EL COMPORTAMIENTO REOLÓGICO DE NANOCOMPUESTOS Y NANOHÍBRIDOS BASADOS EN BIOPOLÍMEROS.

Los nanocompuestos poliméricos son materiales muy atractivos, ya que la inclusión de nanocargas en polímeros conduce a una mejora en las propiedades mecánicas y eléctricas. Los nanotubos de carbono (CNT) son una de las nanocargas conductoras más comúnmente empleados, ya que tienen una relación de aspecto excepcionalmente grande y baja densidad, lo que los hace ideales para mezclarlos con materiales poliméricos. En estas mezclas, los materiales obtenidos muestran un buen equilibrio entre la ligereza y las propiedades, que son ideales para su aplicación en nanotecnología. Los nanocompuestos de poli (ε-caprolactona) (PCL) con CNT tienen aplicaciones potenciales en el mercado de envases biodegradables y en el campo biomédico ya que la presencia de los CNT podría superar las desventajas de PCL con respecto a las propiedades mecánicas y la estabilidad térmica. Se ha llevado a cabo un estudio de mezclas de poli-ε-caprolactona (PCL) con nanotubos de carbono de paredes múltiples (MWCNT) y con nanohíbridos obtenidos del mismo nanotubo pero injertado con PCL de bajo peso molecular, empleando concentraciones de 0,25 a 5% en peso de MWCNT y MWCNT-g-PCL. Hemos encontrado una excelente dispersión de los nanotubos en todas las muestras, lo que conduce a un efecto de supernucleación de ambos tipos de nanocargas. Los nanocompuestos de nanohíbridos con 1% en peso o menos de MWCNT cristalizan más rápido que los nanocompuestos con nanotubo puro (debido a la supernucleación), mientras que la tendencia finalmente se revierte a un contenido de nanotubos más elevado (debido a un proceso de plastificación). Los resultados reológicos muestran que un comportamiento similar en ambos nanocompuestos, incluso para el contenido mínimo de nanotubos de carbono. Sin embargo, la familia MWCNT-g-PCL, cuando se compara con el polímero puro, exhibe valores más bajos de viscosidad y módulo en cizalla oscilatoria, y un mayor grado de fluencia. Estas diferencias reológicas se han discutido en términos del efecto de plastificación causado por la existencia de cadenas de PCL libres e injertadas de bajo peso molecular en los nanohíbridos, lo que tienen grandes consecuencias para el procesamiento de los materiales.

INFLUENCIA DEL USO DE LÁSER CON DIFERENTES LONGITUDES DE ONDA EN LA ELIMINACIÓN DE LOS LÍQUENES QUE COLONIZAN LA PIEDRA DEL PATRIMONIO MONUMENTAL.

La irradiación con láser de la superficie de las piedras de monumentos sirve para el control de las colonizaciones biológicas epilíticas y endolíticas. Investigamos muestras de roca de dos canteras utilizadas tradicionalmente como fuente de piedra monumental, arenisca de Valonsadero (Soria, España) y granito de Alpedrete (Madrid, España), con el fin de encontrar las condiciones para la eliminación eficiente de líquenes y a la vez aseguren la preservación de la roca. Se llevó a cabo un estudio comparativo de limpieza con láser con ns pulsos Q-switched Nd: YAG de 1064 nm (radiación fundamental), 355 nm (3 ° armónico) y 266 nm (4 ° armónico) y secuencias de pulsos IR-UV. La microscopía electrónica de transmisión se usó para determinar las mejores condiciones de irradiación con láser y para detectar posibles cambios estructurales, morfológicos y químicos en las superficies irradiadas. Los resultados muestran que el tratamiento con láser no conduce a la eliminación completa de los líquenes, aunque induce claramente un daño sustancial, en forma de pérdida del cortex superior del líquen y daño a la capa de algas. A medio plazo, estas alteraciones podrían provocar la destrucción de los líquenes, lo que proporcionaría un grado de control de los procesos de biodeterioro del sustrato lítico y reduciría las posibilidades de recolonización.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Condensed Matter Theory.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics, to the Atmosphere and to the characterization of new materials.

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Theories of quantum gravity and multi-fractal geometry.
- Non-local gravitational and field theories.
- Black holes.
- Field theories and geometry.
- 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.
- Mesoscopic and strongly correlated systems.
- Quantum integrable models.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric molecules.
- Van der Waals interaction in ZIFs.
- Photodissociation of organic readicals.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Numerical methods to solve non linear coupled equations.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Renormalization group.
- Floquet theory.
- Fractal geometry and complex systems.
- Non-local operators and diffusion equation.
- Highly correlated ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY:

GRAVITATION

During 2017, the Gravitation and Cosmology Group has made substantial progress in the investigation of criteria that select a unique Fock representation of quantum fields in curved spacetimes. This line of research is of maximum interest in cosmology, because it allows one to extract robust results, eliminating ambiguities in the quantum predictions that otherwise would plague the theory. These uniqueness results are also important inasmuch as they turn out to provide a unique way to separate the quantum dynamics of the fields from that of the background spacetime, something that is necessary if one wants to proceed to a quantum description of the geometry as well. Furthermore, the results have applications in other physical areas, like quantum information or condensed matter, allowing one to determine a unique family of vacua in situations where the background is not stationary, and giving a much suitable description of the dynamics if one wants to discuss subjects such as the preservation of information. Our Group has succeeded in extending previous results about criteria that select a unique family of equivalent Fock quantizations for scalar fields on homogeneous and isotropic backgrounds to the case of some anisotropic spacetimes. Moreover, the results have been

generalized as well to Dirac fields in cosmological scenarios. Using this generalization and combining the Fock quantization of the fermion fields with a Loop quantization of the geometry, a complete analysis of cosmological perturbations in the presence of a Dirac field (treated also as a perturbation) has been carried out. It has been shown that the fermions do not affect significantly the cosmological perturbations in the pre-inflationary and inflationary eras, provided that the vacuum is chosen in the family picked out by our criteria. Furthermore, among the vacua of this family, there is enough freedom to choose a suitable vacuum such that the fermion contribution to the Hamiltonian becomes finite and needs no regularization.

In addition to these studies, the Group has investigated in great detail, both analytically and numerically, the consequences of the hybrid quantization approach for primordial perturbations in Loop Quantum Cosmology, obtaining predictions for the cosmic microwave background and comparing them with data collected by the Planck mission. With this aim, previous analyses about the scalar perturbations have been completed, and tensor modes have been incorporated. The power spectrum of these perturbations has been computed for a variety of vacuum states, analyzing the tensor-to-scalar ratio and the consistency relation between this quantity and the tensor spectral index. The Group has computed the temperature-temperature, electric-electric, temperature-electric, and magnetic-magnetic correlation functions. The effects of the quantum geometry in these correlation functions have been discussed, and the numerical results have been confronted with observations.

New theoretical approaches developed in the last years predict that macroscopic quantum gravity effects in black holes should lead to modifications of the gravitational wave signals expected in the framework of classical general relativity, with these modifications being characterized by the existence of dampened repetitions of the primary signal. For instance, quantization of the gravitational field may allow the existence of a decay channel of black holes into white holes with explicit time-reversal symmetry. The Group has presented the functional integration over a set of spherical geometries using a single-variable function to interpolate between black-hole and white-hole geometries in a bounded region of spacetime. This computation gives a finite probability distribution with an exponential decay law on a parameter measuring the width of the interpolating region, with a mean lifetime inversely proportional to the Schwarzschild mass. Proposals that lead naturally to the existence of echoes in the late-time ringdown of gravitational wave signals from black hole mergers must share the replacement of black holes by horizonless configurations with a physical surface showing reflective properties in the relevant range of frequencies. On the other hand, proposals that restrict quantum gravity effects on the external geometry to be perturbative, such as black hole complementarity, do not display echoes.

In addition, the motivation and construction of a unified theory of gravity and electromagnetism has been revised, following Weyl's insights. It has been shown that the gravitational field equations are equivalent to the (trace-free) Einstein field equations, ensuring their compatibility with known tests of general relativity. Hence the effective cosmological constant is rendered radiatively stable due to Weyl invariance. This also entails the existence of an energy scale below which both the non-integrability of spacetime distances and an effective mass for the electromagnetic field appear simultaneously. It has also been explained how former criticisms against Weyl's ideas lose most of their power in its present reincarnation.

The year 2017 marked an important advancement in the study of the so-called multi-fractional theories, an approach to quantum gravity which has been developed at our department since 2012. In these field and gravitational theories, spacetime structure is the typical one of multi-fractals. We placed very strong observational constraints coming both from the recent observations of gravitational waves by LIGO and from ultra-high-energy cosmic-ray events. Moreover, we quantified and specified the relation between these theories and non-commutative spacetime approaches. This relation was conjectured some time ago without having been clarified satisfactorily, until now. We found that both approaches are mutually independent, despite their similarities. The most important milestone, however, was the formulation of a geometric principle determining uniquely the geometric measure, thus establishing multi-fractional theories and its relatives with non-factorizable multiscale measures as the unique candidates to describe genuinely multi-fractal spacetime geometries. All of this is collected also in a review article constituting the most updated *manifesto* of this theoretical approach. Subsequently, we tackled other aspects of the theory, including the behaviour of black holes and the possibility of an observable imprint in the cosmic background radiation, plus another fundamental achievement: namely, the theoretical “discovery” that dimensional flow (the change of spacetime dimension with the observed scale) typical of all quantum gravities is physically equivalent to the phenomenon of fuzziness, where measurement uncertainties are due to quantum fluctuations of spacetime geometry. The establishment of this duality carries a conceptual economy that will bear consequences not only in multi-fractional theories, but also in all the other quantum gravities.

Using the same tools of anomalous geometry employed in multi-fractional theories, we also proved a theorem relating the spectral dimension of spacetime to the possibility to obtain a finite entanglement entropy density. This work received an Honorable Mention in the **2017 Awards for Essays on Gravitation of the Gravity Research Foundation**.

Last, regarding non-local gravity (an approach independent of those already mentioned here), where dynamics is characterized by non-local operators with infinitely many derivatives, we showed that Schwarzschild (black hole) solutions exist and are stable, at least in one specific version of this theory. This implies that non-local theories are not

free of singularities, contrary to what believed until today. Therefore, by itself non-locality is not sufficient to guarantee the absence of infinities. It remains to be seen whether this conclusion holds also for the super-renormalizable versions of the theory.

Regarding the work on the Hamiltonian formulation of non-standard field theories (models coupling objects of different dimensionalities and in bounded spatial regions with general boundary conditions) the main results obtained concern the unitary implementation of dynamics in 1+1 scalar field models subject to boundary conditions of Dirichlet, Neumann and Robin types and the introduction of trace operators in the context of the quantization of one-dimensional fields coupled to point particles.

As far as the first system is concerned the main result that we have derived is the characterization of the equivalence classes of spacelike embeddings that support unitary evolution. This type of analysis had been performed only for the case of the circle where no boundary conditions are needed. The introduction of boundaries restricts the class of spatial slices that can support unitary evolution, thus the need of a concrete characterization of them. Our results not only provide a useful understanding of the Fock quantization of these models on general spacetime foliations but may also be useful to study more exotic approaches to quantization such as the polymeric ones.

The results on field theories coupling objects of different dimensions, complement those obtained by the group in previous years. In particular, they provide a concrete proposal to introduce auxiliary Hilbert spaces for the dynamical objects sitting at boundaries and the necessary operators to describe their dynamics (the so called *trace operators*). This is an interesting problem because the Hilbert spaces of these composite models cannot be factored as the tensor product of Hilbert spaces naturally associated with the continuous part (a string) and the point particles tied to its boundaries. The present knowledge about these type of systems opens up the possibility of using them to model complicated quantum phenomena related to the measurement problem and the study of the classical limit that we plan to pursue in the immediate future by relying on the Fock quantization of linear field models.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Beta-decay properties of neutron-rich nuclei

One of the main issues studied along this year has been the beta-decay properties in various nuclear mass regions characterized by deformed ground states. In particular, we have studied systematically neutron-rich nuclei in the rare-earth region. These nuclei are known to participate in the astrophysical rapid neutron capture process (r process) and are directly involved in the generation of the rare-earth peak in the isotopic abundance pattern centered at masses around $A=160$. Namely, isotopes of Xe, Ba, Ce, Nd, Sm, Gd, and Dy with neutron numbers between $N=86$ and $N=126$ are included in this study.

The nucleosynthesis r process is believed to be the main responsible for the stellar nucleosynthesis of heavy elements leading to the production of heavy neutron-rich nuclei and for the existence of about half of the nuclei heavier than iron in the universe. The half-lives of these nuclei determine to a large extent the possible r-process paths, the isotopic abundances, and the time scales of the process. Although much progress has been done recently on masses and half-lives measurements, unfortunately most of the nuclear properties of relevance for the r process are experimentally unknown yet due to their extremely low production yields in the laboratory. Therefore, reliable nuclear models are needed to interpret the astrophysical observations and to model and simulate properly the process.

Our theoretical model is a proton-neutron QRPA approach based on a self-consistent Hartree-Fock deformed mean field formalism with Skyrme interactions and pairing correlations in the BCS approximation. Residual spin-isospin interactions are also included in the particle-hole and particle-particle channels. The structural evolution in the various isotopes and their equilibrium shapes are obtained from their energy-deformation curves. It is worth mentioning that nuclei in the rare-earth region are presently beyond the capability of full shell model calculations. Thus, a QRPA approach to the problem is likely the state-of-the-art and the best option for this study.

We have determined beta-decay half-lives, beta-delayed neutron emission probabilities and energy distributions of the Gamow-Teller strength. The results have been compared with the available experimental information and with other calculations using different methods. In general, a reasonable agreement with experiment is obtained. These calculations are timely because they address a mass region which is at the borderline of present experimental capabilities at MSU (USA) and Riken (Japan).

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 alpha-alpha 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 .

Three-body systems (halo nuclei) with mean field interactions

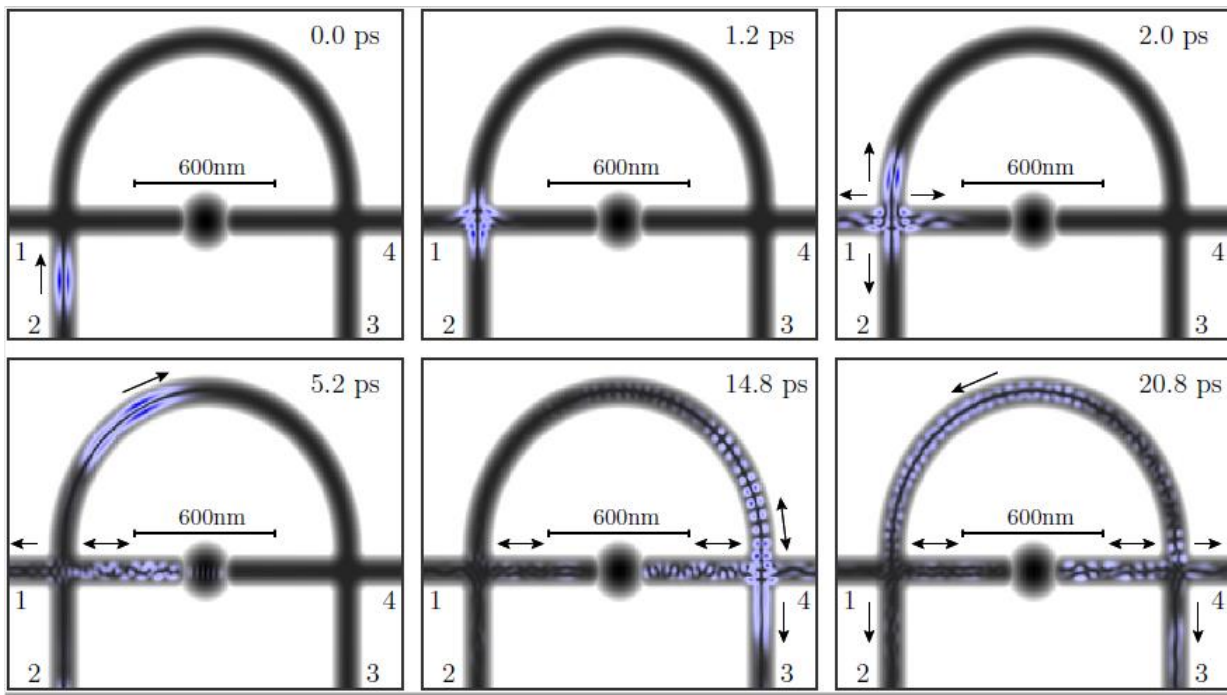
An important aspect of the work recently developed has been the implementation of a new method that permits to construct the interaction between clusters from a standard mean field calculation. More precisely, the idea has been to take into account the structure of the core in order to build a mean field interaction, which the one felt by the halo nucleons. In this way, few- and many-body degrees of freedom are combined in a new computationally efficient model applicable to both bound and continuum states and adaptable to different subfields of physics. We formulate a self-consistent three-body model for a core nucleus surrounded by two valence nucleons, where the core is treated in the mean-field approximation and the same effective Skyrme interaction is used between both core and valence nucleons. We apply the model to ^{26}O , where we reproduce the known experimental data as well as phenomenological models with more parameters. The decay of the ground state is found to proceed directly into the continuum without effect of the virtual sequential decay through the well-reproduced $d_{3/2}$ resonance of ^{25}O .

CONDENSED MATTER THEORY

Mesoscopic disordered systems and quantum transport

We have studied the level repulsion and its relationship with the localization length in a disordered one-dimensional quantum wire excited with monochromatic linearly polarized light and described by the Anderson-Floquet model. In the high-frequency regime, the linear scaling between the localization length divided by the length of the system and the spectral repulsion is the same as in the one-dimensional Anderson model without driving, although both quantities depend on the parameters of the external field. In the low-frequency regime the level repulsion depends mainly on the value of the amplitude of the field, and the proportionality between level repulsion and localization length is lost.

We have also performed numerical simulations of the electronic wavepacket temporal evolution through Aharonov-Bohm interferometers with a quantum dot in one of its arms. These devices can be used to measure the transmission phase through the quantum dot. However, much care has to be taken when analyzing the influence of the scattering processes in the junctions of the arms of the interferometer. The simulations were performed using quantum time evolution algorithms implemented in GPUs. In this sense, we have shown that the transmission phase lapses between consecutive peaks and the modulation of the heights of Coulomb blockade peaks are closely related quantities and that their correlations could be measured experimentally.



Snapshots of the time evolution of a wave-packet through an electronic Aharonov-Bohm interferometer with a quantum dot in one of its arms.

Quantum integrable models

The BCS model, of interest in condensed matter and nuclear physics, has been solved exactly by Richardson for discrete systems in the sixties. It has been also shown that in the thermodynamic limit, or equivalently the continuous limit, the exact solution coincides with the BCS approximation. However, there are important problems in nuclear structure in which bound finite systems or their resonances require the mixing of discrete and continuous single particle levels. In order to develop an exactly solvable model for these problems, we extended the Richardson exact solution to the Bergreen basis that includes bound state, resonances and the non-resonant continuum. As a numerical test, we solved the Bethe equations and compared the numerical results with the exact diagonalization of the Gamow shell model with the same interaction.

Moreover, quantum integrable models that can be solved exactly for large systems with polynomial complexity, are excellent benchmarks for modern many-body approximations. As an example of these approaches, Coupled cluster and symmetry projected Hartree-Fock are two central paradigms in electronic structure theory. However, they are very different. Single reference coupled cluster is highly successful for treating weakly correlated systems but fails under strong correlation unless one sacrifices good quantum numbers and works with broken-symmetry wave functions, which is unphysical for finite systems. Symmetry projection is effective for the treatment of strong correlation at the mean-field level through multireference non-orthogonal configuration interaction wavefunctions, but unlike coupled cluster, it is neither size extensive nor ideal for treating dynamic correlation. We examine different scenarios for merging these two dissimilar theories. We carry out this exercise over the integrable Lipkin and Agassi Hamiltonians, which despite its simplicity, encompass non-trivial physics for degenerate systems and can be solved via diagonalization for a very large number of particles. We show how symmetry projection and coupled cluster doubles individually fail in different correlation limits, whereas models that merge these two theories are highly successful over the entire phase diagram. Despite the simplicity of these integrable Hamiltonians, the lessons learned in this work will be useful for building an ab initio symmetry projected coupled cluster theory that we expect to be accurate in the weakly and strongly correlated limits, as well as the recoupling regime.

Electronic transport in 3D topological semimetals

The bulk-edge correspondence and the topological protection of edge states are on the basis of the interesting properties of systems with topologically non-trivial band structure. While in 3D Dirac and Weyl semimetals the surface states form the celebrated Fermi arcs joining the projection of the nodes onto the given surface, the nodal-line semimetals have a wider collection of surface states giving rise to the so-called drumhead within the projection of the nodal circle. As long as the nodal ring and associated surface states are protected in nodal-line semimetals, it becomes quite pertinent to study

their evolution under suitable perturbations, which may help to engineer the strong correlations at the surface of the electron system. In this regard, we have investigated the behavior of 3D nodal-line semimetals under strong magnetic fields, showing that such electron systems can be driven into a topological insulating phase in which the electronic transport takes place through chiral currents at the surface of the material.

More specifically, we have unveiled the potential of the 3D nodal-line semimetals to support a phenomenon which is the analogue of the 2D quantum Hall effect but promoted to a higher spatial dimension. We have shown that, when the magnetic field is perpendicular to the nodal ring, the evanescent states of the nodal-line semimetal remain stabilized in a zero-energy level with huge 2-parameter degeneracy arising from the collapse down to zero-energy of a large number of 2D-like Landau levels. We have found that there is a deep reason for the topological protection of these Landau surface states as they correspond to exceptional points, i.e. branch points which arise upon extension of the spectrum to complex values of the momentum. In this context, we have seen that one can apply the properties of such exceptional points to account for the quantization of the Hall effect in 3D slabs of nodal-line semimetals.

Quite remarkably, we have also found that a magnetic field parallel to the nodal ring has the effect of pairing the evanescent waves inside the bulk of the semimetal, leading to states that reside in parallel 2D slices of the 3D material. This constitutes a perfect version of 3D quantum Hall effect, of which very few examples are known. We have seen that, in thin films of nodal-line semimetals, the Landau states with genuine 2D extension form a flat band in the bulk but start to get some dispersion as they approach the surface of the semimetal. This explains that the electronic transport takes place through chiral surface states, which are the analogue of the edge excitations for this exotic kind of 3D Hall effect.

We have performed numerical calculations to estimate that a surface Hall effect may in general survive when the nodal-line semimetal is under perturbations with a strength smaller than the gap between the zero-energy Landau level and the next higher bands. Nevertheless, we have seen that, when the perturbations preserve the particle-hole symmetry of the electron system, the complex structure tied to the exceptional points lends a much larger stability to the zero-energy flat bands in the spectrum. In these conditions, the Hall conductivity can be expressed in terms of the integral of a suitable Berry connection, in the same fashion as in the 2D Hall effect. As a counterpart, we have also shown that the complex structure of the spectrum (for complex values of the momentum) allows to express the number of zero-energy flat bands in terms of a new topological invariant, counting essentially the number of exceptional points and ensuring its topological character from the impossibility of removing such branch points by smooth perturbations of the spectrum.

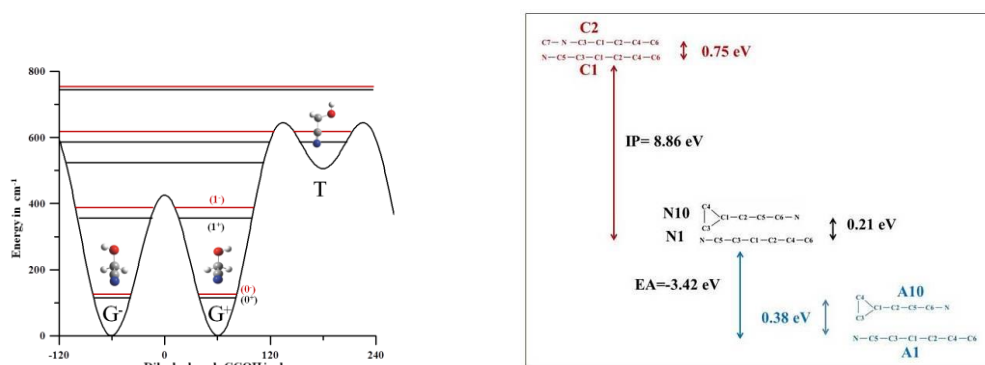
THEORETICAL PHYSICAL-CHEMISTRY APPLIED TO ASTROPHYSICS AND TO THE CHARACTERIZATION OF NEW MATERIALS

The research group employs highly correlated ab initio methods to characterize molecular species and chemical processes of astrophysical interest, to describe new materials with application to CO₂ capture and storage, and to determine Rydberg and dissociative electronic states of organic radicals.

During the year 2017, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within 2 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. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres. During the last years, our research focuses on organic cyanides.

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 2017, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C₆N in collaboration with researchers from the University of King Saud of Ryad. In collaboration with the Laboratory of Astrophysics of the Rennes Institute of Physics we explored anions of small carbon chains. 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 rovibronic effects. Detailed attention was given to the 66 isomers of the unsaturated radical C₆N.

The new radioastronomical observatories will allow the detection of new molecules and new isotopic varieties if their rotational spectra in the millimeter and sub-millimeter regions are recorded and analyzed at the laboratory level. Highly correlated ab initio calculations allow determine molecular structures, as well as to obtain initial sets of spectroscopic parameters that can facilitate the assignments of these spectra. Special interest show the calculation aimed to the spectroscopic characterization of non-rigid prebiotic species that present vibrational levels likely to be populated at very low temperatures. These are suitable of been detected in vibrational excited states in star formation areas. During 2017, especial attention was given to organic species that present intramolecular hydrogen bonds, like as ethylen-glycol. In collaboration with the MW laboratory of the University of Lille we have studied several organic cyanides such as NC-CH₂OH and NC-CCC-CH₂OH.



Last studies within the frame of the Marie Curie FP7-CAPZEO concerning the interaction of CO₂ and water with imidazoles, have been published. The aim is to predict the ability of materials type ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) for the caption and storage of atmospheric species. Molecular calculations (interaction potentials and structures) take advantage in future studies of simulation of solids. During 2017, we emphasized on the problem of the competition between CO₂ and other greenhouse effect gases (CO, SO₂, NH₃) for their capture in ZIF's.

2B.2 NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Nuclear Structure studied at intermediate energies.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.
- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Surface Spectroscopies.
- Surface Plasmon Photonics and Metamaterials.
- Biospectroscopy.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Biological applications of vibrational spectroscopy.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of dripline nuclei.
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Nuclear Instrumentation.
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot).
- Data Analysis tools.
- Nuclear Physics experiments for FAIR.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Computational methods in gravitational physics.
- Black hole analogs in condensed matter.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- 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 and biondiagnosis.
- Localized Plasmon resonances in metal nanostructures (nanoantennas).
- Metamaterials with HRI dielectric materials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Quantum Plasmonics.
- 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.
- Gamma spectroscopy.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Gas adsorption techniques.
- Absorption techniques.
- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- 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 and mathematical physics.
- IR Spectroscopy (FTIR).
- Raman Spectroscopy.
- Multivariate Statistical Analysis.
- Time- and space-resolved Imaging techniques.

RESEARCH ACTIVITY:

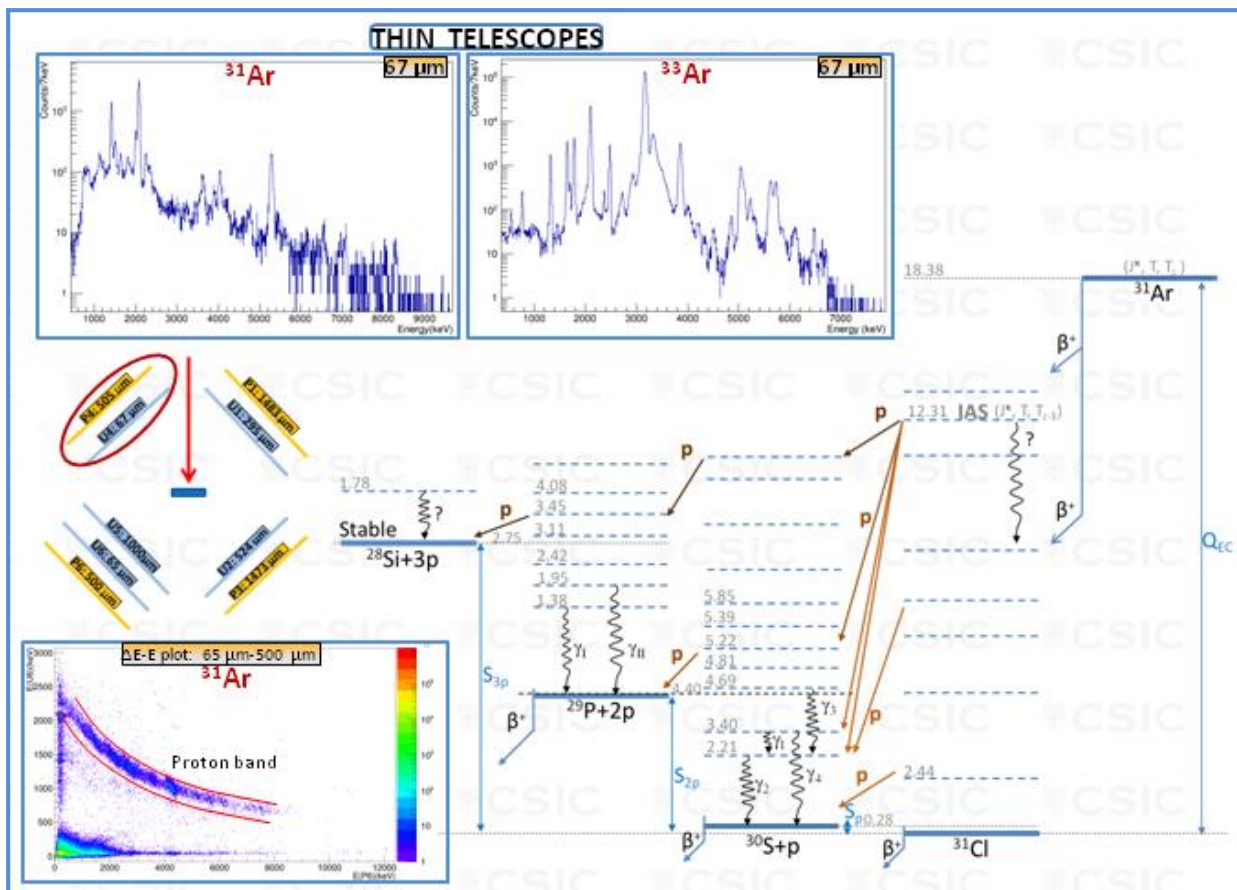
IS577 EXPERIMENT: NUCLEAR STRUCTURE STUDY OF ^{31}Ar @ ISOLDE (CERN)

(FPA2012-32443 Project, PhD student FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Náchter, ÁngelPerea)

Our isotope of interest in this study is ^{31}Ar . It is a light exotic nucleus at the limit of the stability, placed near the proton drip-line. It is a β -delayed proton emitter with high Q_β -value and low proton separation energy. Therefore, many channels are open, so it can emit one proton, two protons and even three protons, after its β -decay. The goals of our work are mainly two: the analysis of β_2p , β_3p channels and the IAS (Isobaric Analog State) decay from ^{31}Cl (beta daughter nucleus of ^{31}Ar).

The decay of ^{31}Ar was measured in the IS577 experiment at the ISOLDE Decay Station (IDS), placed at ISOLDE-CERN (Geneva, Switzerland), becoming the first of its kind (multi-particle emission) performed successfully at the IDS installation. It is a new permanent station devoted to β -decay studies, composed of 4xHPGe clover detectors for γ -ray detection surrounding the experimental chamber. The chamber can be adapted and adjusted for different kind of measurements involving β -decay studies (nTOF, particle emission, etc.). In our case, we used the *MAGISOL Si-Plugin chamber*, designed and tested in our group (IEM-CSIC), within the international MAGISOL collaboration (Madrid-Aarhus-Goteborg). It contains an array of 5 Double-sided Silicon Strip Detectors (DSSSD, 5x5 cm, 16x16 strips) backed by unsegmented silicon detectors (PAD) in ΔE -E configuration for β and charged particle detection. This setup is very compact with high efficiency (solid angle 47% of 4π), low cut off energy (150 keV), also good energy and angular resolution (25 keV, 3°).

The decay of ^{33}Ar was also measured in the experiment. It allows for a full determination of energy and efficiency calibration of the setup. Due to highly performing system, new low energy proton peaks are seen for the first time in this kind of β -decay studies. In the study of ^{31}Ar , we observed high fragmentation of the IAS which populates all levels in ^{30}S , new energy levels in ^{31}Cl are proposed and clear identification of those near the proton threshold in ^{30}S has been done (astrophysical interest). The ongoing analysis is the topic of the PhD thesis of the student Irene Marroquín.

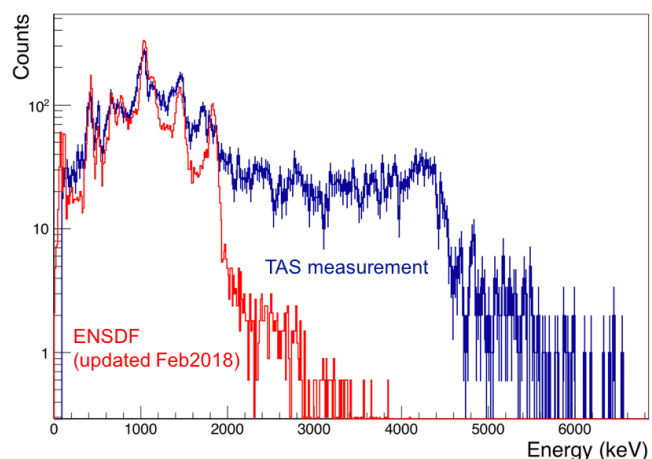
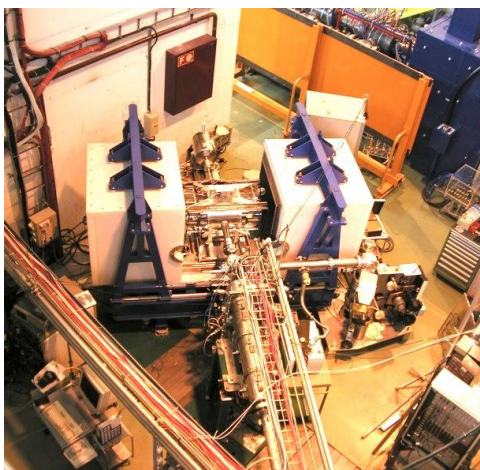


Ip spectra from telescopes are shown together with the 2d ΔE -E plot and the array of detectors DSSSD (U1-U6) and PAD (P1-P6) used in the experiment. The level scheme of ^{31}Ar is also shown. Thanks to the good qualities of the setup, the spectra show very good energy resolution at low and high energies. New proton peaks are seen, and the level identification can be done.

IS570 EXPERIMENT: BETA DECAY OF THE $N=Z$, RP-PROCESS WAITING POINTS: ^{64}Ge , ^{68}Se AND THE $N=Z+2$: ^{66}Ge , ^{70}Se FOR ACCURATE STELLAR WEAK-DECAY RATES
(Enrique Nácher, Olof Tengblad, Ángel Perea)

We measured the beta decay of ^{64}Ge and ^{66}Ge at ISOLDE (2015) for its importance in the determination of weak-decay rates in some explosive stellar processes such as "x-ray bursts". These scenarios are fundamental in nucleosynthesis by rapid proton capture process (rp process). We use the total absorption spectroscopy technique for its high efficiency to determine the beta intensity distribution in these disintegrations.

In 2017 we have advanced in the data analysis and we already have spectra in which we can see all the part of the disintegration that had not been seen until now due to lack of detection efficiency.



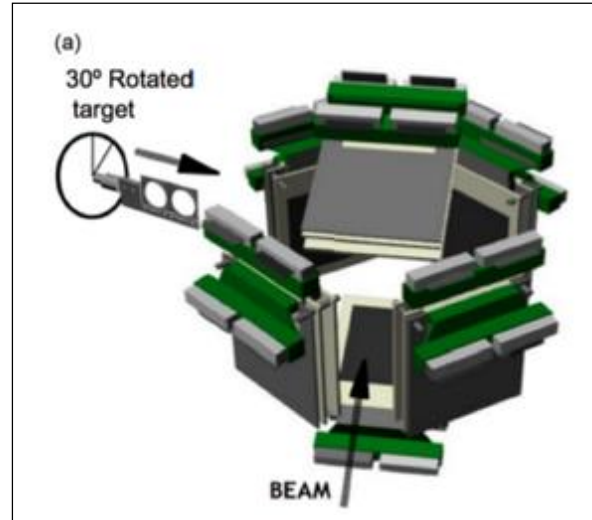
IS619 EXPERIMENT @ HIE-ISOLDE

(I. Martel, O. Tengblad, MJG Borge, A. Perea, J. Díaz).

The first dynamical study of the ^{15}C halo nucleus at energies around the Coulomb barrier was possible thanks to the latest improvements in the HIE-ISOLDE line, and was carried out in August 2017. The halo structure of ^{15}C has been debated as the binding energy for the last neutron is 1215 keV. The aim of this experiment is to measure the angular distribution of the elastic scattering, as well as the neutron-transfer and breakup channels, since they are expected to bring new information about their coupling and the ^{15}C nuclear structure.

A 4.3 MeV/u ^{15}C beam was provided by the CERN facility, impinging on a 208Pb target surrounded by 6 double sided silicon stripped telescopes with an angular coverage from 15-165° (lab frame). A neutron detector system covering forward directions consisted of 30 plastic scintillators+PMTs was used too. Data analysis is currently ongoing, dealing with energy calibrations and Monte Carlo simulations of the experimental setup.

Fig. The GLObal Reaction Array (GLORIA) setup used for the experiment. 6 DSSDs telescopes are arranged tangent to a 6 cm radius sphere with its center in the reaction point. 40 μm ΔE -detectors are backed by 1 mm E-detectors in order to ensure particle identification for light isotopes. All DSSDs have 16x16 strips (256 pixels 3x3 mm²).

**IS633: Electron capture of ^8B into highly excited states in ^8Be**
(PhD student Silvia Viñals i Onsès, Olof Tengblad)

The ^8B nucleus is the only known case that in its ground state has a proton halo configuration, this means that one of its protons has a very low binding energy and orbits as a satellite around the core of ^7Be . In its beta decay (β) it populates a wide range of excitation energies of the son nucleus whose structure at low energy has been studied in detail in relation to the production of solar neutrinos. The excitation energy states in ^8B of interest for this thesis are the doublet state 2^+ , at 16.6 MeV and 16.9 MeV. The objective of this work is, on the one hand, to determine the relative population of these states and, from this, to deduce the configuration of isospin. In the other hand, it is intended to detect for the first time the state that is populated by electron capture (17.6 MeV).

Up to now, the analysis presents very promising results since the statistics obtained for the state of 16.9 MeV is much higher than in previous studies and will allow study of the properties of the doublet. In addition, with the data obtained of the efficiency of detection at low energies in the experiment, it has been possible to plan the next experiment that will focus on the optimization of the detection of the proton ejected from the state 17.6 MeV that has an energy of 337 keV.

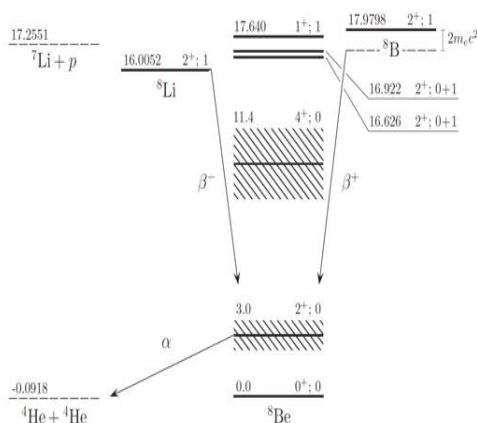


Figure 2: Level scheme of the ^8B decay into ^8Be

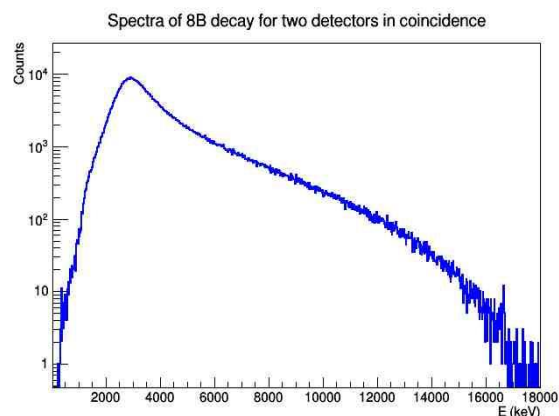


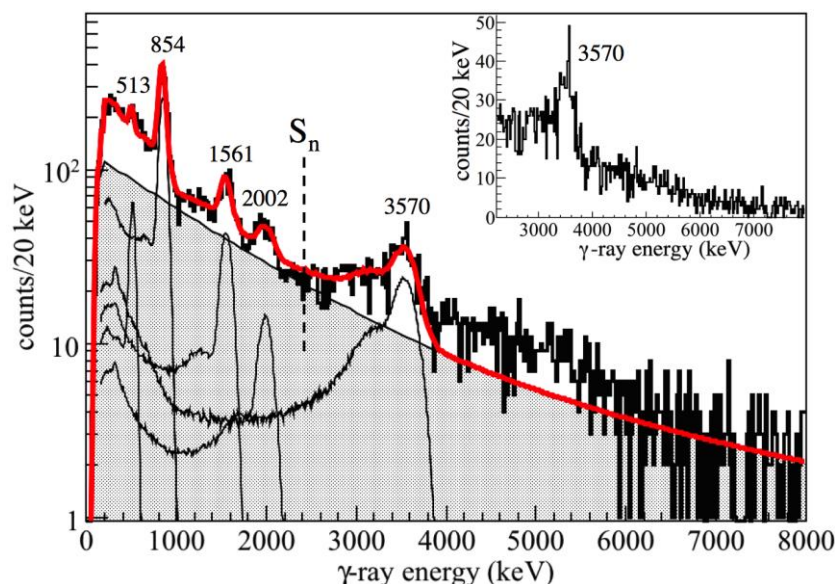
Figure 2: Energy spectra of the 2α due to the fragmentation of ^8Be as a consequence of the ^8B decay

NP1306-RIBF98R1 EXPERIMENT: IN-BEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF NUCLEI NEAR THE DOUBLY-MAGIC ^{132}Sn @ RIKEN

(FPA2014-57196-C5-4-P, PhD student FPI2015 Víctor Vaquero, Andrea Junglaus)

The main aim of this experiment was to perform nuclear structure studies of neutron rich nuclei situated near the doubly-magic nucleus ^{132}Sn . The experiment was carried out in the laboratory called RIKEN situated in Tokyo, Japan. This facility provides the more intense radioactive beams of the world via the IN-FLIGHT technique. Once the isotopes of interest were produced, separated and identified, they were studied through of in beam gamma-ray spectroscopy using the DALI2 spectrometer.

The experimental analysis and the theoretical interpretation of this experiment is part of the Victor Vaquero thesis. One part of the data has been already published in May of 2017 in the prestigious journal Physical Review Letters (V. Vaquero et al. Phys. Rev. Lett. 118, 202502 (2017)). In this article we have studied the exotic nucleus ^{133}Sn , which consists of a single neutron coupled to the doubly-magic nucleus ^{132}Sn . Besides the known γ rays emitted in the decay of the single-particle states (transitions at 513, 854, 1561, and 2002 keV), clearly additional γ strength is observed above the neutron separation energy, reaching up to about 5.5 MeV. These excited states are interpreted as neutron-hole states. These neutron-hole states are expected to decay via neutron emission because they are situated far above the neutron separation energy (2.402 (4) MeV). However, the ability of γ -ray emission to compete with neutron decay is explained taking into account the structure of the initial and final states and the resultant wave-function overlap. Our study raises the question whether, due to nuclear structure effects, the γ -ray emission may play a much more significant role than generally assumed in the decay of highly excited states populated following β decay in the region southeast of ^{132}Sn .



Doppler-corrected γ -ray spectrum of ^{133}Sn populated via one-neutron knockout from ^{134}Sn .

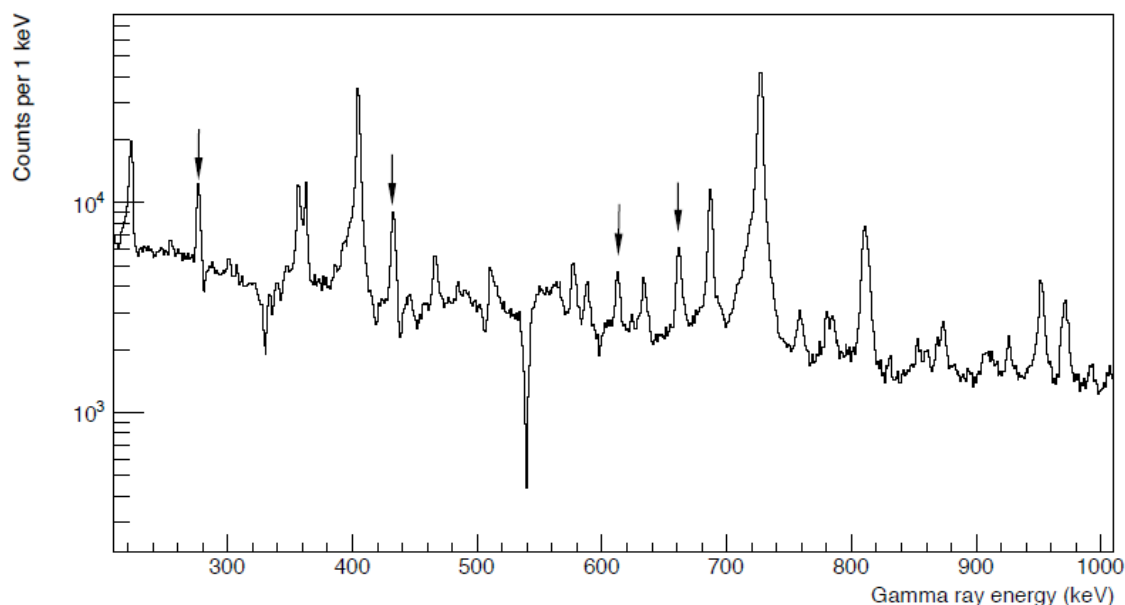
EXPERIMENT E693: EXPLORATION OF CLUSTER STRUCTURES IN ^{212}Po WITH AGATA@GANIL

Recent gamma spectroscopy of ^{212}Po suggested that not only its alpha decay properties come out from strong alphaclustering correlations between its valence nucleons, being also responsible for the enhanced electric dipole transition probabilities between some of its excited states. With the aim of better understand its nuclear structure properties, experiment E693 was conducted at the accelerator complex of GANIL (France) in May 2017. The chosen technique for lifetime analysis was the Doppler Shift Attenuation Method (DSAM), whose sensitivity to short lifetimes is maximized by the unprecedented spatial resolution of the AGATA spectrometer.

The ^{212}Po nucleus was produced by means of the alpha transfer reaction $^{12}\text{C} (^{208}\text{Pb}, ^{212}\text{Po}) ^8\text{Be}$ at a center of mass energy of 64.7 MeV. The experimental setup, which was optimized in detail before the experiment, consisted of AGATA in nominal configuration plus a cylindrically symmetric Double-Sided Silicon Strip Detector (DSSSD). The AGATA array was made up of 35 crystals arranged in 11 triple clusters plus a double cluster, enabling the detection of gamma rays emitted at backward angles ranging from to $120\text{--}140^\circ$ to 170° and providing a geometrical detection efficiency of nearly 1π . The DSSSD was segmented into 32 rings and 64 sectors covering polar angles from 25° to 52° and the entire azimuthal range, respectively. The latter was placed behind the target to detect the forward-focused, light reaction products and

particularly the 2 alpha particles emerging from the fast ^8Be breakup. Tantalum absorbers were installed in front of the DSSSD to shield the detector against ^{12}C ions elastically scattered off target.

The high granularity of the DSSSD in combination with particle and gamma time coincidences enables us to apply clear physical conditions to isolate, clean and study the data from the reaction channel of interest. This, together with the state-of-the-art, highly customizable gamma-ray tracking capabilities of AGATA will be used for data optimization. The analysis is ongoing and it is framed within the PhD thesis of Álvaro Fernández under the supervision of Dr. Andrea Jungclauss.



Gamma ray energy spectrum of ^{212}Po . The transitions marked with an arrow correspond to the most visible transitions depopulating lowest lying sequence of states proposed to be pure alpha cluster states.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

Molecular hydrogen (H_2) is probably the most obvious current candidate to replace fossil fuels as an environmentally neutral energy vector. The safe and efficient storage of H_2 presents, however, a series of technological challenges not yet solved. One of the possible solutions is the adsorption of H_2 at low temperatures in sufficiently light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (that of liquid air) and about 50 atmospheres of maximum pressure. This imposes particularly problematic thermodynamic conditions since, above 33 K, molecular hydrogen is supercritical, that is, it is impossible to condense it whatever the pressure. Only by extreme confinement comparable to the molecular size itself, can this thermodynamic restriction be overcome. During 2017 we have applied state of the art quantum-mechanical calculation methods to the study of the molecular Deuterium (hydrogen isotope) confined in carbon nanotubes. Nowadays it is not possible to study more than three interacting molecules at this level. In spite of such, the calculations have allowed us to advance in the comprehension of the quantum behavior of these systems. The calculations also support that quantum delocalization stabilizes ordered confined phases with the same symmetry as the bulk crystal which corresponds to a phase of maximum molecular packaging. They are also in agreement with preliminary experimental results currently under careful study.

In collaboration with the experimental group of Andrey F. Vilesov at the University of Southern California, we have developed an atomistic numerical modeling of the deposition process of metallic nanoparticles on carbon surfaces by means of nanodrops of superfluid He. From this kind of realistic modeling we hope to get to fully understand of the processes of diffusion and aggregation of the particles after landing.

GLASSY PHENOMENOLOGY IN CRYSTALS WITH MINIMUM DEGREE OF DISORDER

In this line, we collaborate with the group of Prof. Josep Tamarit of the Universidad Polit cnica de Barcelona. The efforts in recent times have focused on the study of crystalline systems which, due to the presence of some kind of disorder,

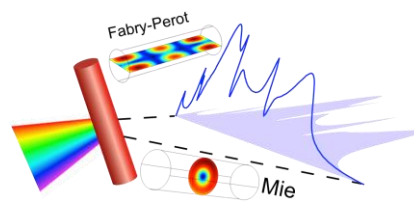
present, at least in part, the same phenomenology exhibited by disordered media in their thermal, mechanical or dielectric properties at low temperature. Such a disorder can be of a static nature, generated for instance by differences in the distribution statistics of a substituent, or of a purely dynamic nature. The purpose of this line of research is that these materials, by presenting a quantifiable type of disorder, make it possible to unequivocally identify the microscopic entities capable of coupling with the acoustic field and generate the phenomena that give rise to the aforementioned anomalies (two levels, "soft" modes, etc.).

DEVELOPMENT OF ADVANCED INSTRUMENTATION FOR NEUTRONE SOURCES

A good part of the effort during the course has focused on the study of the generation and accumulation of radionuclides resulting from the operation of the tungsten target to be installed in the European Spallation Neutron Source as well as the temporal evolution of the residual radiotoxic inventory a once the target has ceased its operation. In addition, radiation damage studies have been carried out on the neutron generation elements of the target as well as on structural elements, which has allowed to estimate the time of life in operation of this element.

OPTICAL FANO RESONANCES IN SEMICONDUCTOR & METAL NANORODS

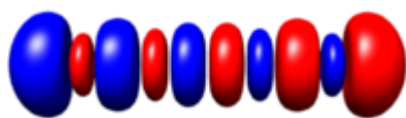
Fano resonances in plasmonics have received widespread attention for their distinctly narrow asymmetric line shapes. A variety of configurations have been considered in recent years, either requiring complex metallic nanostructures or being extremely faint if originated in simple single nanoparticles. Last year, we have reported on the emergence of high-contrast, strongly asymmetric Fano line shapes in the light scattered from semiconductor nanorods, in collaboration with CICESE (Ensenada, México) thanks to CSIC i-COOP LIGHT NANOFOTOPLAS project. Such (predicted) Fano resonances could be potentially exploited in nanophotonics and sensing in the visible and near-IR, eased by simplified fabrication requirements of shape (nanorod) and material (semiconductor). In this regard, a low-cost, fast and sensitive plasmonic sensor with a large-size for easy handling has been developed in collaboration with the Institute of Micro- and Nano-Technologies (CSIC). The sensor is formed by a Au nanobelt grating fabricated by soft lithography; it makes use of the Fano-shaped third order mode localized plasmon resonance of the Au nanobelts, which appears in the visible part of the transmission spectrum (predicted by our group a few years ago). The high uniformity and size of the sensor permit the detection using a simple optical system, which provides the device with the potential to be used as an easy to handle, portable and disposable sensor.



RESONANT DYNAMICS IN PLASMONICS AND MAGNETIC LIGHT

We have continued our longstanding work on plasmonics, concerning theoretical and numerical tools required for the determination of the spectral properties of complex-shape nanoparticles exhibiting strong localized surface plasmon resonances (LSPs). In particular, we have focused on an analytical description of the ultrafast LSP and magnetic resonance dynamics in a single nanoparticle (Ag or Si), driven by an ultrashort (fs time scale) Gaussian pulse. Three possible scenarios have been found depending on the incident field: pulse duration much shorter than, similar to, and much longer than the optical resonance lifetime. Nanoparticle resonance dynamics may lead to a wealth of new phenomena and applications in nanophotonics such as multipole order resonance interference, pulse-induced delay or temporal shaping on the fs scale, high harmonic generation, attosecond near-field pulse sources, and electron acceleration from metasurface or 3D engineered nanostructures. Work developed in collaboration with the Imperial College (London), supported by MINECO Excelencia Project LENSBEAM.

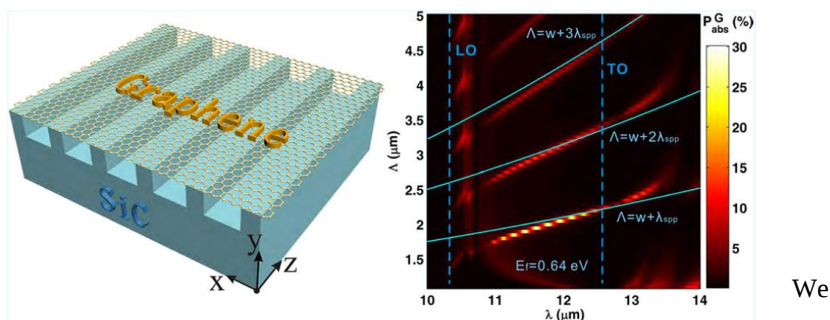
QUANTUM PLASMONICS



One of the ultimate goals of modern science is the precise control of single photons at the atomic level, the excitation of plasmons allows nanoscale localisation of electromagnetic energy and is a promising path towards this aim. Quantum plasmonics is the study of plasmonics in tiny systems where confinement of the valence electrons modifies the optical response. Recently there has been much interest in exploring the ultimate small size limit of quantum plasmonics in molecules. By the manipulation of individual atoms/molecules, properties of light, such as the local field enhancement, gradient and polarisation, can be controlled on the angstrom scale. This paves the way for new systems in quantum optics, as well as nano-localised photochemistry and the design of efficient molecules for light-matter interaction. We studied theoretical modelling of quantum plasmonic nanoantennas and the analogies to classical antennas. We also explored the importance of phonons in quantum plasmonics, the generation of hot electrons and justify the concept of molecular antennas.

GRAPHENE PLASMONICS

We discovered how to create tunable plasmonic cavities in the infrared (IR) range using graphene films suspended upon a silicon carbide (SiC) grating and presented a numerical investigation, using the finite element method, on the absorption properties and field distributions of such resonant structures. We find at certain frequencies within the SiC reststrahlen band that the structured SiC



substrate acts as a perfect reflector, providing a cavity effect by establishing graphene plasmon standing waves. We also provided clear evidence of strong coupling phenomena between the localized surface phonon polariton resonances in the SiC grating with the graphene surface plasmon cavity modes, which is revealed by a Rabi splitting in the absorption spectrum. This paves the way to build simple plasmonic structures, using well-known materials and experimental techniques, that can be used to excite graphene plasmons efficiently, even at normal incidence, as well as explore cavity quantum electrodynamics and potential applications in IR spectroscopy.

NANOFABRICATION

The nanofabrication of nanostructures with advanced optical properties was one of the main objectives of our group. The interaction of appropriated light with plasmonic nanoparticles (NPs) leads to a high intensification of the local electric field, which is the basis for the molecular detection based on Raman and fluorescence. This is why during the past year we have developed methods of synthesis of nanoparticles with interesting applications both in spectroscopy and catalysis. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been also made to develop protocols for the preparation of silver nanostars with tailored morphology, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in Surface-enhanced Raman scattering (SERS) and Surface-enhanced fluorescence (SEF), because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the nearinfrared. 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. Along 2017 nanoparticles fabrication methods have been improved, going into detail about the characterization of the surfaces electric potential.

In collaboration with researches of the Institute of Optics, we have developed the obtention of Ag and Au nanostructured surfaces on modified surfaces by laser processed is being performed. One of the employed methods is pulsed laser deposition (PLD) that gives rise to high plasmonic performance surfaces. The optimization of these deposition processes is being carried out.

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 2017. 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. Emsamblers with internal cavities (cavitands), such as cyclodextrines functionalized with thiol groups are being used, as these groups increase the adsorption of those compounds on the surface. Other type of interesting cavitands, the calixarenes, are also being tested. These compounds are fabricated by diverse methods giving rise to different structures that are being used on the nanostructured surfaces. The synthesis of calixarenes is being carried out in the Universidad de Chile, in collaboration with a laboratory in the frame of an iCOOP project.

POLLUTANT DETECTION

The surfaces obtained by nanofabrication have been applied in the detection of pollutants, basically difficult to degrade pesticides. Firstly, detection protocols have been developed for molecules that interact directly with the surface and do not need surface functionalization. Functionalization by cyclodextrines and calixarenes has been applied in the assembly and detection of POPs (persistent organic pollutants) that do not have active chemical groups able to interact with the metal.

APPLICATION OF CONVENTIONAL AND SURFACE VIBRATIONAL SPECTROSCOPY TO THE ANALYSIS OF BIOMOLECULES

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. A study of the interaction mechanism of therapeutical peptides such as somatostatine, othreotide, lanreotide and pasereotide with Ag and Au nanoparticles was conducted. To that effect probe molecules of these peptides containing the triads of aminoacids able to interact with the surface have been used.

The study of the SERS/SEF characterization of humic substances of different origin 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. This study was performed in commercial humic substances named "standard", which are the ones usually employed in all laboratories. The functionalization of the surfaces was carried out with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. The functionalization process leads to a substantial increase of the SERS signal, due to the fact that these important natural compounds are negatively charged. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy).

Finally, in collaboration with the Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, a research line was started during the 2017 dealing with the study of a methodology of analysis of bones based on the application of the Raman technique.

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

Progress has been made in the study of the Cultural Heritage, in particular, the detection of dyes of difficult study by the normal Raman technique. Within this research line, the in-situ fabrication of silver NPs on natural fibers of wool by laser irradiation has been improved. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna. The employ of this type of metallic substrates is very important for the analysis of artistic pigments and dyes. This is due to the ability to be prepared directly on a specific spot of the material (fibres, in this case) without leaving any mark on it. Irradiation at 442 nm gives rise to more versatile nanoparticles than irradiating at 532 nm. In the first case, SERS spectra can be obtained at various wavelengths (442, 532 and 785 nm). In the second case, SERS analysis can only be carried out at 532 nm. The optimization of the experimental conditions, such as laser power, irradiation time and silver nitrate concentration was carried out. The prepared nanoparticles were used for the analysis of synthetic dyes on mock and real samples of dyed wool samples.

The techniques of in-situ fotoreduccion and the simply deposition of star-shaped nanoparticles on historical fibers of the Chilean Cultural Heritage have allowed the detection of other molecules of biological origin in samples containing cochineal. This finding allows obtaining important archaeological information about the staining process used.

Regarding this research line, a collaboration with the Scientific Research Department of the Metropolitan Museum of Art has started. It deals with the study of dyes used in Japanese woodblock prints from the Edo and Meiji periods. The aim of this research is the analysis of the composition of the dyes in order to relate them with the different historical periods of the Japanese country during 19th Century. During the stay at the Museum the extraction of the red colorant from the safflower leaves and the following study by SERS spectroscopy was carried out. Different experimental conditions were used (pH, HF vapor hydrolysis, etc.). Additionally, the same experiments were performed in a Japanese paper safflower sample prepared by Prof. Tsuji. Similar results were obtained. Finally, the HPLC study of the dyes from the two samples was carried out and the same components were identified. Another collaboration has been started with researches of the University of California Los Angeles (UCLA) in order to apply SERS spectroscopy for the analysis of samples with historical interest in the P. Getty Museum in Los Angeles.

On the other hand, the fabrication of silver nanoparticles by laser irradiation of a silver target in water was continued in collaboration with the Laser, Nanostructures and Materials Processing group of the Instituto de Química-Física Rocasolano (CSIC). The Ag irradiation procedures were repeated in different experimental conditions (laser wavelength, irradiation time and fluency) in order to study the reproducibility in the preparation of the silver colloids. Besides, the characterization of the nanoparticles was carried out by UV-Vis spectroscopy and TEM microscopy, together with the study of the effectiveness of the prepared SERS supports. In collaboration with this research group the influence of the wavelength on the laser removal of liquens colonizing heritage stones was carried out.

The calcium silicate hydrate (C-S-H) is the main component of the binders used in restoration since the 19th century and its properties depend on its nanostructure and its composition, the latter in terms of Ca / Si ratio. Starting from reagents of different nature and microstructure, the size of the hydrated calcium silicate nanoparticles formed has been determined, being smaller if the initial material is nano-sized, which also influences the morphology of the nanoparticles.

The possibility of synthesizing AgNPs supported in calcium silicate hydrate, synthesized following the previous methodology, is explored. The variables to be studied are the concentration of Ag, the temperature and the presence of aluminium in the hydrated calcium silicate. These compounds would be biocompatible and therefore their possible use as drug transport agents will be studied. In collaboration with the IETCC, work is being done on the application of Micro-Raman and SERS to the study of the additive / cement paste interaction, which will allow deepening into the adsorption phenomena of the additives, variation of the formation kinetics and morphology of the reaction products.

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of astrophysical and atmospheric systems.
- Study of cold plasmas by radioastronomical techniques.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Crystalization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- Spectroscopic parameters of molecules of interest in atmospheric or combustion processes.
- High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.
- Spectroscopic analysis of phyllosilicates.
- Theoretical characterization of secondary uranium oxide phases produced in conditions of storage of nuclear fuel.

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 and millimetric emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear and Stimulated Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics.
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy.

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research is divided in the following sub-lines:

Molecular physics of astrophysical and atmospheric systems

One of our sub-lines is devoted to the investigation of ices similar to those present in different astrophysical environments, like the surface of interstellar dust grains, the surface of cold transneptunian objects, or in comets nuclei. Those ices contain mainly H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, and other minority neutral or ionic species. In particular, during 2017 we have concentrated in the study of ices of light hydrocarbons like CH₄, C₂H₆ and C₂H₄. At the IEM ice laboratory, we recorded NIR and MIR spectra of pure species and binary mixtures of CH₄, C₂H₆, and C₂H₄ at 18 K and 30K, monitoring changes in peak position and band intensities in the mixture spectra with respect to the pure species spectra. Additionally, in collaboration with M. A. Satorre from the Universidad Politécnica de Alcoy, with whom we have a Coordinated Project funded by MINECO, we have been able to determine absolute band intensities and infrared optical

constants of these materials. The Alcoy group measures the density of ices grown at the same deposition conditions than those grown at IEM. Moreover, the visible refractive index, n_0 , of these materials is also obtained at the Alcoy laboratory. The density is necessary to estimate the infrared band strengths and the n_0 to obtain the IR optical constants of the ices. During 2017 we have set up a revised, improved version of our program that allows determining optical indices from IR spectra. This is a very interesting tool for astronomical research. Our results have been published in two papers in 2017.

The recent detection of methyl isocyanate (CH_3NCO) in astrophysical media has awakened the interest on this species. We have started a joint investigation with J.C. Guillemin (Rennes, France), who has prepared and sent us samples of this molecule and its deuterated isotopologues, and J. Cernicharo (IFIC, CSIC). We have recorded and analyzed the IR spectra of ices of this species and mixtures with H_2O , at astrophysical relevant temperatures, and measured the band strengths of the IR features. We have also performed theoretical calculations which have enabled us to derive, for the first time, the crystalline structure of the corresponding ice. This has led to the publication of one first article, in which we claim that this molecule may form stable mixtures with water at those low temperatures. We also propose the best signature for its eventual detection in other astrophysical media, and, by using the measured absorption intensities, the estimation of the amount of methyl isocyanate in different environments.

We have continued on our collaboration with the Institute of Low Temperature Science (ILTS) of the University of Hokkaido at Sapporo, and in particular with the group of Profs. Naoki Watanabe and Akira Kouchi, funded by an i-link CSIC project. They have first class experimental equipment which has been used to study $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}$ ice mixtures at various conditions. Our collaboration started initially with the prediction of the IR spectra of these mixtures, and the comparison with the observations. This work has given rise to two publications, in 2016 and 2017. During 2017 we have opened new subjects of collaboration, facilitated by several interchange visits of IEM researchers to Sapporo and Japanese researchers to Madrid and Granada, where we have participated in a joint workshop. The new collaborations deal with spectroscopic effects on ices of irradiated amorphous water, surface effects on hydrogenated carbonaceous (HAC) samples, and Al oxide nanoparticles. They are all under progress. Results are expected along 2018.

With respect to the development of new experimental equipment, our new ultra-high vacuum chamber designed in 2016 has been tested and checked that we can reach a base pressure in the range of 10^{-10} mbar. This chamber opens a new field of possibilities, allowing us to simulate astrophysics surface processes or experiments that require very high purity or large time scales. We have started to study the interaction of methane molecules on HAC surfaces generated in our labs.

We have continued on our spectroscopic research on 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 μm of quartz, feldspat, calcite, iron and aluminum oxides, silicon, gypsum and aragonite, in collaboration with Dr. Ana María Fernández (CIEMAT). A similar study, from the technical point of view, has been started on minerals similar to the so-called regoliths, found on meteorites and other solar system objects, like the surface of Mars. In particular, we have recorded spectra of different phyllosilicates, like those mentioned above, measuring their absorption coefficients. This task was carried out as part of the Graduation work of Alba Suárez, from Rey Juan Carlos University. In this project we work in collaboration with the groups of Miguel Angel Satorre (UPV, Alcoy) and Olga Muñoz (IAA-CSIC, Granada), with whom we participate in an "Excellence Network" of the MINECO coordinated by the group of Guillermo Muñoz Caro at CAB (INTA-CSIC).

Within the frame of a Unidad Asociada with the Department of Physical Chemistry of the Complutense University, we have been collaborating with Dr. Pedro C. Gómez Calzada on the theoretical calculation of different molecular systems for several years. In recent times, we are working on a new field, consisting in the prediction of spectra in the near-IR region of amorphous ices by means of Molecular Dynamics. In particular, our aim is to predict the spectra of solids made of H_2O and various small molecules, like CO_2 , CH_4 and others, such as are found to exist in the so-called Trans Neptunian Objects, including Pluto and Charon, for which new data are becoming available from the New Horizons mission.

Generation, processing and study of films of Hydrogenated Amorphous Carbon

We have carried out new studies on the formation of analogs of carbonaceous interstellar dust using cold plasmas generated in inductive RF discharges of He/CH_4 mixtures. The HAC deposits formed have been characterized mainly by IR spectroscopy and have been bombarded with 5 keV electrons to simulate the effect of cosmic ray radiation. Previous literature, work on the subject showed discrepancies between two experiments based on ion bombardment. In our laboratory we have studied the decay of the 3.4 μm band as a function of electron fluence to the sample, and the enlargement of other IR bands arising from C=C bonds, that reveal alterations in the composition of the material, with release of molecular hydrogen. With the incorporation of new techniques, namely Secondary Emission Electron Microscopy (SEM) and visible-UV reflectivity, and the measurement of the density of the carbonaceous material, we have new results which are pending publication with the PSST journal. We have also generated carbonaceous films using different precursors, like C_2H_2 , and are in the process of studying the IR spectra and properties of these new materials.

We have concluded, for the time being, our investigation on these HAC systems from a theoretical point of view, mainly using the CASTEP program, which allows predicting IR spectra for different structure as function of different variables, like for instance, density, which is crucial and not always accurately measured in astronomical samples. Our results have been compared with laboratory samples generated from mixtures of He and CH₄. Our calculations suggest that hydrocarbon interstellar dust could have a structure made of small aromatic islands linked by aliphatic chains, with a density of $\sim 1 \text{ g cm}^{-3}$. One more article has already been published on this PCCP.

Nanoparticles generation in complex plasmas

This is one of the research subjects included in our Research of Excellence Project of MINECO and also in the Nanocosmos Project of the EU. Our work has consisted on the generation and characterization of plasmas of different gases, using our capacity coupled radiofrequency discharge reactor, specifically designed to produce high-content carbon nanoparticles, relevant for astrophysical media. Our first results of characterization of particles by optical emission spectroscopy, from Ar, He and H₂ as filling gases have constituted the bulk of the Graduation Project of Magín Parra Serrano. We have just incorporated C₂H₂ to the He plasmas, leading to the formation of nanoparticles inside the reactor. The generation process has been followed by means of images of the expansion of a laser beam, collected on a CCD chamber.

Spectroscopy of cold plasmas by radioastronomy techniques

Within the European Synergy Grant - Nanocosmos we have continued on to perform rotational emission spectroscopic measurements using the 40 m antenna of the Observatorio Astronómico de Yebes (Guadalajara). We have used very sensitive and precise radioastronomic techniques and studied different radicals and stable molecules with a low-pressure gas cell prototype. The new species have been generated by inductively-coupled RF discharges and photodissociation induced by UV lamps. The first results have been accepted at Astronomy and Astrophysics and are already available online. Simultaneously, we have designed a larger gas cell which will be coupled to new radioreceptors built at the Yebes Observatory, aiming to achieve optimized plasma and photodissociation experimental conditions.



Discharge chamber, detector of millimetric radiation and focusing set-up in the Observatorio Astronómico de Yebes to study the rotational emissions of radicals and molecules generated in cold plasmas.

Visible emission spectroscopy diagnosis of cold plasmas generated by sputtering

Also as part of EU Nanocosmos Project, we have an ongoing investigation on the spectroscopic characterization of magnetron-generated plasmas at the Stardust machine, a powerful equipment set up at the ICMC (CSIC) by Prof. J.A. Martín Gago and his group. With this instrument it is expected to generate dust nanoparticles similar to those occurring at the interstellar medium, and to thoroughly study them. In particular, during 2017 we have recorded spectra of plasma generated on targets of C, Fe and Si, using Ar as filling gas and eventually O₂ to promote oxygenation of the particles. The first results have been sent for publication.

LASER SPECTROSCOPY

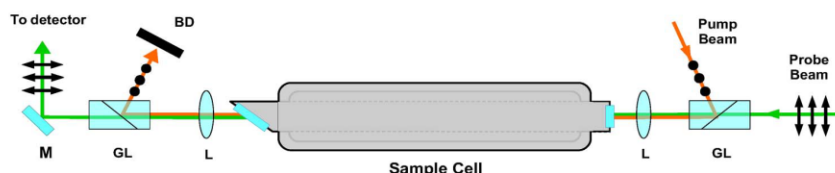
High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance

We have measured 23 vibration-rotation lines of the SiH⁺ ion in the 1902–2236 cm⁻¹ interval. This ion has been identified in the solar photosphere through its visible absorption spectrum, but it remains undetected in the interstellar medium. The available spectroscopic information was scarce, and there were no direct measurements of the pure rotational transitions, which, in principle, could be more appropriate for a potential detection in space. Using the difference frequency laser spectrometer coupled to the hollow cathode reactor, we have made precise measurements of the vibration-rotation spectrum, whose analysis has lead to a reliable prediction of the rotational transitions. Those have been subsequently measured in the I. Physikalische Institute at the University of Cologne, in collaboration with Dr. Oskar Asvany and Prof. Stephan Schlemmer, employing the Laser Induced Inhibition of Complex Growth in a criogenic ion trap. These measurements, both in the IR and the sub-mm wave regions, open-up the possibility to search for or identify this ion in space.

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

Nearly the whole extent of the experimental work carried out through the year 2017 in the Laser Spectroscopy Laboratory has dealt with the study of the molecule of deuterium (D₂), both pure and as part of the deuterium-helium (D₂-He) collisional system. The interest of such collisional system resides in the fact that it is composed by a molecule-atom pair in which the molecule is an isotopologue of the simplest and lightest molecule known, while the atom is also the lightest inert atom in existence. Thus, the D₂-He pair constitutes a benchmark system for the study of collisional phenomena. The analysis of such systems is especially useful for the development and validation of the theoretical methods and calculations used in the study of collisions, since the simplicity of the colliders allows these calculations to be carried out in a relatively quick fashion, without the very high computational cost associated to the study of heavier molecules or more complex molecular systems. This, in turn, allows a quick identification of the problems or imperfections of the methods and a faster advance in the necessary improvements and refinements.

The experimental study of the D₂ molecule was carried out in all cases (pure and as part of a molecule-atom collisional system) using the technique of Stimulated Raman Spectroscopy (SRS), duly modified in order to be able to obtain rotational Raman spectra of D₂. The use of SRS to record rotational Raman spectra involves a number of difficulties associated to the low frequency of the transitions under study. This low frequency imposes the need need to operate the two main lasers of an SRS experiment, pump at probe, at frequencies very close to each other, which in turn causes considerable difficulties when both beams have to be separated after travelling through the sample cell. In our laboratory the problem was dealt with by reconfiguring the experimental setup to work with crossed polarizations in the two laser beams, which required the introduction of significant modifications in different parts of the spectrometer. The attached figure shows a scheme of the sample cell, the perpendicularly polarized pump and probe beams travelling through it and the system of polarizing prisms used to overlap and later separate the laser beams.



Scheme of the sample cell area showing the overlapping and separation of the pump and probe laser beams in an SRS experiment with crossed polarizations

The D₂-He collisional system was systematically studied at three different temperatures, 77, 195 and 300 K, and at pressures ranging from 100 to 1200 mbar approximately. The spectral profiles obtained for the rotational lines were analyzed by fitting them to Voigt profiles, which reproduce the experimental shapes of the spectral lines very satisfactorily in the referenced pressure range. The analysis of both the collisional widths and the frequencies of the maxima of the spectral lines and their variation with collider (He) pressure yielded numerical values for the collisional broadening (γ) and shift (δ) coefficients of the spectral lines in the D₂ molecule.

The values obtained experimentally have been compared with those obtained, through the use of *ab initio* quantum scattering calculations particularized to the D₂-He system, by professors F. Thibault (University of Rennes) and P. Wcislo (University of Torun). The agreement is excellent and the results have already been send for publication in the *Journal of Raman Spectroscopy*.

In addition to the study of the D₂-He system, frequency measurements in pure D₂ were also carried out with the aim of improving the values available in the bibliography. The results obtained boast a precision approximately one order of

magnitude better than the bibliographic ones, and a communication is already being prepared and is expected to be published in the coming months.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The Molecular Fluid Dynamics group is a pioneer experimental group in the quantitative study non-equilibrium flows of fluids. The Laboratory of Molecular Fluid Dynamics is furnished with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twentyfive years, whose performance and flexibility are unique worldwide. We have continued along 2017 studying 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. 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. On the other hand, 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.

We have carried out numerous experiments on supersonic jets of pure H₂ and D₂, aimed at accurately measuring the number density and the rotational populations. Since the accuracy of these measurements depends markedly on the uniformity of the CCD detectors, an intensity calibration of their columns has been done. The new corrected data have allowed us to rebuild backwards the gas-dynamic evolution of the jet in terms of the molecular collisions, up to points inside the nozzle.

On the other hand, we have carried out new experiments on supersonic jets of mixtures of natural-D₂ with H₂ and He, at different mixing ratios, and of ortho-D₂ diluted at 10% in He. These experiments are aimed at measuring the rotational relaxation of H₂ and D₂ due to the inelastic collisions between them, as well as the rotational relaxation of D₂ due to collisions with He atoms. These data are currently being analyzed using the new procedures for sensitivity calibration developed in the H₂ expansions.

Regarding the methodological development, the generalized Boltzmann equation have been rewritten within the context of supersonic jets, obtaining a more manageable master equation than the previous versions. The new formalism, which is exact, highlights those flow quantities that really govern the supersonic expansion. Amongst others it shows that conventional rotational temperature concept is not rigorous, and must be replaced by several rotational temperatures, one for each excited populated state. The formulation allows factoring the effect of collisions and thermal bath, revealing a clearest overview of the hierarchy of concurrent collisional events. The critical importance of the breakdown of the equilibrium between the rotational and translational degrees of freedom is also highlighted, and the changes in their behavior, which is extremely non-linear at distances close to the nozzle, and almost linear at distances further than one diameter of the nozzle. Due to this development, the experimental level-to-level inelastic collision rates of molecular hydrogen have been determined with unprecedented precision (~ 3-4%) over a wide thermal range (270 to 40 K) in a single experiment.

Finally, we have finished, in collaboration with the University of Frankfurt (Germany), a study on the crystallization of liquid undercooled water started in 2014 in our laboratory. Liquid water microdroplets in vacuum are rapidly cooled due to surface evaporation, reaching a minimum temperature of 230.6 K before their crystallization. The water droplets were probed by recording their Raman spectra to know if they were still liquid or solid. By analyzing resonant signals in the Raman spectra, decrease in diameter of the droplets was tracked with high accuracy, and measure their temperature. These experiments allow a better understanding of the anomalous properties of water, which affect the climate and life on Earth.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Formation of simple molecules in the interstellar medium by silicate-surface catalysis

We have started in 2017 a collaboration with the groups of A. Rimola (UAB) and J. Kästner (University of Stuttgart) to study the formation of water in two steps ($H + O \rightarrow OH$, $OH + H \rightarrow H_2O$) on the surface of forsterite, a mineral present in the interstellar medium in crystalline form. We are using available codes (Gaussian, CRYSTAL, CP2K) plus our own programs. This is a very exothermic reaction, ruled by the diffusion of H atoms at the surface. The H atoms can be trapped at wells in the potential energy surface, which would inhibit the reaction. It could only proceed through the tunneling effect. Forsterite is a selected material for these initial studies, and could be replaced by amorphous surfaces, more abundant in the interstellar medium, in future investigations. The first results are in the process of being published, and have already been presented at scientific conferences.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

In collaboration with F. J. Aoiz (U. Complutense) and V. Sáez Rábanos (UPM), we have started the study of reactivity in the “tunneling” region, which corresponds to collision energies below the classical reaction threshold, for two prototype systems: $O(3P)+H_2$ y $F+HD$. In the former, we have focused on the correlation between potential surfaces and Λ splitting of the OH products. In the second, we investigate a dynamic resonance on the vibrational excitation of HD, appearing at very low collision energy ($\approx 5 \times 10^{-3}$ eV), but still above the ultracold Wigner regime.

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation. Ultracold Quantum gases

We have continued the study of transport control in a quantum gas of interacting atoms or molecules. The proposed method requires an external time-dependent periodic potential -spatially asymmetric but symmetric in time-, along with a modulation of the interaction parameter in a pulsed way. Without interaction, the external potential induces an oscillating current whose average value must be asymptotically zero due to symmetry constraints. However, our previous work shows that the parameters can be chosen in such a way that the induced current shows a very simple oscillating behavior with large amplitude and controllable period, which can be chosen to match the relevant time scales of a given problem. In the presence of interaction, this regular oscillation can only be maintained within a limited range of the interaction to external potential ratio. Outside this range a strong interaction destroys the regularity of oscillations and the external potential is not able to modify the current. Thus, the control of the interaction parameter can start or stop a current change in the system in a very precise way, allowing for the generation of an asymptotic current whose direction and magnitude can be changed with successive pulses. This year we have studied the conditions that enhance the current and optimize its control. Due to the strong nonlinear character of the problem the current can exhibit a host of possible behaviors, ranging from rather regular and stable to aperiodic and extremely irregular oscillations.

Theoretical characterization of secondary phases of uranium oxides formed under the conditions for storage of nuclear fuel

This research subline began after a first contact with members of the High Activity Radioactive Waste Unit of CIEMAT, where its research involving oxidation-hydration process of uranium dioxide leads the study of secondary phase formations of spent nuclear fuel. This research was being studied by experimental methods, mainly X-ray diffraction and Raman spectroscopy in the CIEMAT, and we in the IEM were invited to apply the theoretical methodology to the research in these lines in the crystallographic, infrared and Raman spectroscopy.

The characterization of structures was addressed by computing the crystalline structures of the corresponding materials using ultrasoft pseudopotentials (US), then due to the difficulties we encountered, a new conservative pseudopotential was generated from the beginning, a uranium pseudopotential type GGA-PBE relativist and norm conservative to determine the structure and the vibrational spectra within the CASTEP code. The pseudopotential was validated by calculating the structures of a large number of secondary phases and the Raman spectrum of the mineral uranyl carbonate ruderfordin. The results were excellent and were published in the journal Physical Chemistry Chemical Physics at the end of 2016.

The first mineral studied was ruderfordin, where X-ray diffractograms and Raman spectra associated with both structures were remarkably similar. And also the presence of bands corresponding to water molecules in the Raman spectrum required the study of the introduction of water into the structure. It was observed that there were some bands in the experimental Raman spectrum that did not appear in the theoretically calculated spectrum. These bands, therefore, should be due to the fact that the natural sample studied was a mixture of minerals. It was verified that these extra bands were due to the presence of traces of the minerals schoepite and uranofane.

After this work, the study of uranyl studtite peroxide was carried out. The material was synthesized in CIEMAT, where its thermal stability was being studied by means of Raman spectroscopy in situ where in the modeling the functional PBE was used together with the empirical correction of Grimme. They resulted in structures very well converged being a very good agreement with the geometry and pattern of experimental X-rays. Therefore, the theoretical determination of the Raman spectrum was addressed and all the bands of the experimental spectrum were assigned for the first time. The assignment of the band corresponding to the vibration of symmetric narrowing UO and the experimental analysis of its displacement with temperature allowed studying the thermal stability of studtite in the presence and absence of water. The combined theoretical-experimental study was published in the journal Spectrochimica Acta A.

After this, the theoretical study of the thermodynamic properties of these uranium oxides was addressed. The thermodynamic and mechanical properties and the state equation of the uranyl carbonate or ruderfordin result were published in the Journal of Physical Chemistry C. These results proved the crystal structure of ruderfordin was mechanically and dynamically stable, and predictions were made for a large number of mechanical properties for which no experimental measurements existed. Recently the same has been done with the mineral uranyl silicate soddyite which resulted in an article published in the Journal of Solid State Chemistry. It has been found that the theoretical methods

have a great predictive power in the investigation of materials that contain the atom of uranium. This has been found not only for the secondary phases resulting from the oxidation-hydration of spent nuclear fuel, but also for anhydrous uranium oxides such as UO_3 . The results obtained for the structural, thermodynamic properties, the state equation and the Raman spectrum of the polymorph γ of uranium trioxide were published in the Journal of Physical Chemistry C. The structural and spectroscopic results are in excellent agreement with the experimental information. In this way, the almost total uncertainty in the allocation of its Raman spectrum has been solved since all the bands of this spectrum have been assigned. Finally, an excellent agreement has been found with the thermodynamic properties obtained experimentally both at low and high temperature, and the values of the modulus of elasticity and its derivatives have been predicted.

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

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.
- Nanoindentation.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and and tetradetection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Simulations using high performance computing.

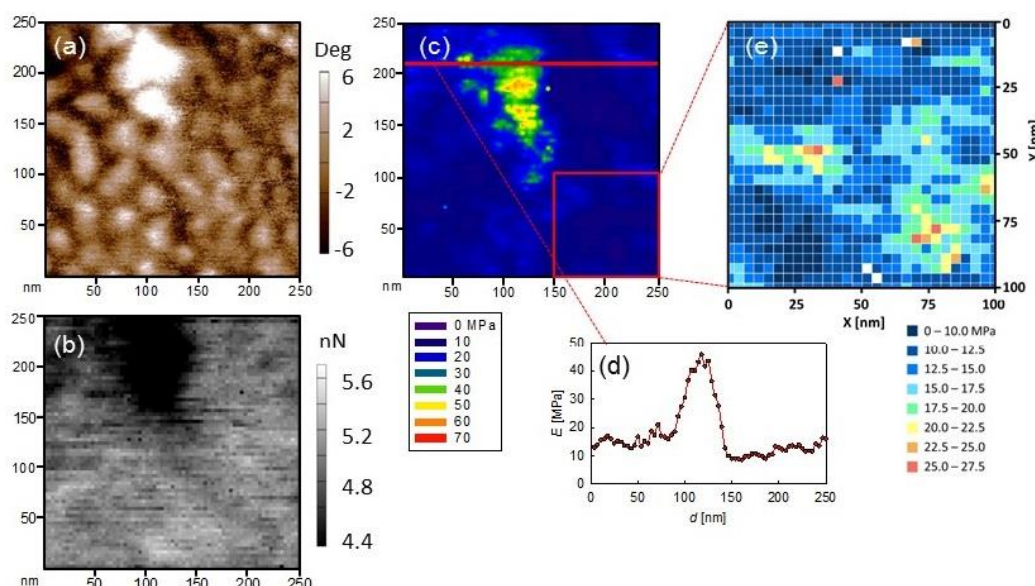
RESEARCH ACTIVITY:

Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS

STRUCTURE AND PROPERTIES OF GRAPHENE-REINFORCED POLYPROPYLENE NANOCOMPOSITES

The aim of this work, carried out in collaboration with the group of Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), is to develop new nanocomposites based on polypropylene and graphene for potential applications in the transportation industry. Commercially available graphene has been modified with short polypropylene brushes and incorporated into polypropylene in small amounts. Conductive materials with enhanced mechanical properties have been obtained. It is found that the functionalization of graphene enhances the thermal stability, electrical conductivity and mechanical performance of the nanocomposites. The mechanism of reinforcement has been investigated at different scales using nanoindentation, tensile testing and Raman spectroscopy. On the one hand, it is observed that the nanostructural changes taking place in the polymer matrix as a consequence of the incorporation of graphene do not produce a relevant change of mechanical properties. Thus, mechanical enhancement is interpreted in terms of the intrinsic properties of graphene and of the interaction with the host matrix. The orientation of graphene during mechanical loading becomes relevant to the overall reinforcement, being especially significant for the case of functionalized graphene.

AFM NANOINDENTATION ON CONDUCTIVE ELASTOMERS



AFM nanoindentation data of a nanocomposite of poly(styrene-*b*-ethylene-co-butylene-*b*-styrene) (SEBS) with 2.1 vol.% of graphene modified with polystyrene brushes: (a) Phase image, (b) adhesion map, (c) modulus map, (d) *E* profile along the red line in (c), (e) magnification of the region under the square marked in (c).

The experimental part of this work was carried in collaboration with the group of Prof. Holger Schönherr at the University of Siegen (Germany). The aim of the work is to gain a comprehensive understanding of the local mechanical behaviour of a series of graphene-reinforced poly(styrene-*b*-ethylene-co-butylene-*b*-styrene) (SEBS) nanocomposites.

SEBS is a triblock copolymer with elastomeric properties that undergoes phase separation and in the present case the polystyrene blocks are arranged in cylindrical domains. Graphene can impart electrical conductivity to SEBS and this broadens the field of applications to flexible electronics, actuators or bodily motion sensing. Graphene has been functionalized with short-polymer brushes of ethylenic or styrenic nature to enhance the interactions of the filler with specific blocks of the copolymer. The present work approaches the study of the nanomechanical properties of SEBS/graphene nanocomposites as a means to understand the macroscopic behaviour. It has been found that by decreasing the size of the indentation down to only a few nanometers, the mechanical properties of the PS cylinders (with average diameter of ≈ 20 nm), the PE blocks and graphene can be distinguished, as shown in the figure. The modulus maps of all nanocomposites with different graphene type and content have been analysed with regards to the frequency of appearance of each modulus value. Results show that neat SEBS exhibits a symmetric distribution while the nanocomposites display a high-modulus tail characteristic of each material. It is found that this tail is related to the specific morphology of each material in the presence of graphene.

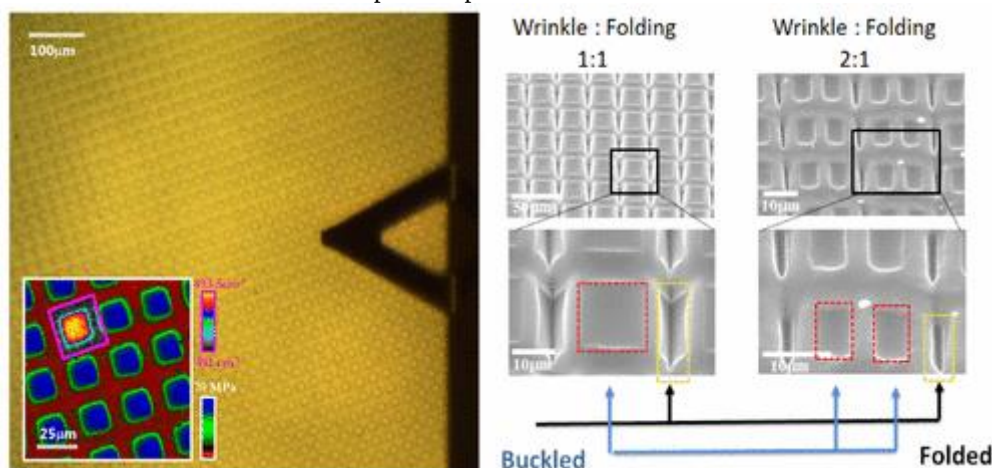
Group of DYNAMICS AND STRUCTURE OF SOFT AND POLYMER MATTER (SOFTMATPOL)

RELAXATIONS AND RELAXOR-FERROELECTRIC-LIKE RESPONSE OF NANOTUBULARLY CONFINED POLY (VINYLIDENE FLUORIDE)

In collaboration with Dr. Jaime Marín from Imperial College, London, we have continued with the study on the structure and properties of polymers under confinement. In this particular case we have elucidated the impact of tubular confinement on the structure and relaxation behavior of poly(vinylidene difluoride) (PVDF) and how these affect the para-/ferroelectric behavior of this polymer. We use PVDF nanotubes that were solidified in anodic aluminum oxide (AAO) templates. Dielectric spectroscopy measurements evidence a bimodal relaxation process for PVDF nanotubes: besides the bulk-like α -relaxation, we detect a notably slower relaxation that is associated with the PVDF regions of restricted dynamics at the interface with the AAO pore. Strikingly, both the bulk-like and the interfacial relaxation tend to become temperature independent as the temperature increases, a behavior that has been observed before in inorganic relaxor ferroelectrics. In line with this, we observe that the real part of the dielectric permittivity of the PVDF nanotubes exhibits a broad maximum when plotted against the temperature, which is, again, a typical feature of relaxor ferroelectrics. As such, we propose that, in nanotubular PVDF, ferroelectric-like nanodomains are formed in the amorphous phase regions adjacent to the AAO interface. These ferroelectric nanodomains may result from an anisotropic chain conformation and a preferred orientation of local dipoles due to selective H-bond formation between the PVDF macromolecules and the AAO walls. Such relaxor-ferroelectric-like behavior has not been observed for nonirradiated PVDF homopolymer; our findings thus may enable in the future alternative applications for this bulk commodity plastic, e.g., for the production of electrocaloric devices for solid-state refrigeration which benefit from a relaxor-ferroelectric-like response.

WRINKLING AND FOLDING ON PATCHED ELASTIC SURFACES: MODULATION OF THE CHEMISTRY AND PATTERN SIZE OF MICROWRINKLED SURFACES

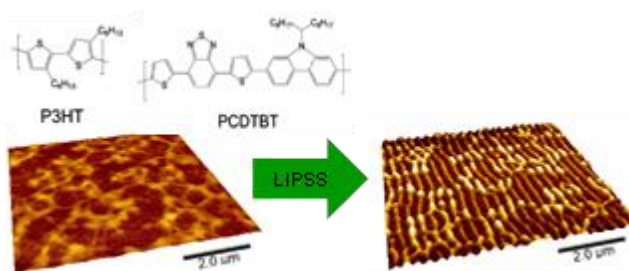
In collaboration with Dr. Juan Hernández Rodríguez, from ICTP-CSIC, we have started a new research line dedicated based on an unconventional strategy that takes advantage of localized high-deformation areas, referred to as folded wrinkles, to produce microstructured elastic surfaces with precisely controlled pattern dimensions and chemical distribution. For that purpose, elastic PDMS substrates were prestretched to a different extent and oxidized in particular areas using a mask. When the stretching was removed, the PDMS substrate exhibited out-of-plane deformations that largely depend on the applied prestretching. Prestretchings below 100% lead to affine deformations in which the treated areas are buckled. On the contrary, prestretchings above $\epsilon > 100\%$ prior to surface treatment induce the formation of folded wrinkles on those micrometer-size ultraviolet-ozone (UVO) treated areas upon relaxation. As a result, dual periodic wrinkles were formed due to the alternation of highly deformed (folded) and low deformed (buckled) areas. Our strategy is based on the surface treatment at precise positions upon prestretching of the elastic substrate (PDMS). Additionally, this approach can be used to template the formation of wrinkled surfaces by alternating lines of folded wrinkles (valleys) and low-deformed areas (hills). This effect allowed us to precisely tune the shape and distribution of the UVO exposed areas by varying the prestretching direction. Moreover, the wrinkle characteristics, including period and amplitude, exhibit a direct relation to the dimensions of the patterns present in the mask.



SYNERGY OF NANOSTRUCTURE FORMATION BY LASER IN ALL-POLYMER HETEROJUNCTIONS

In collaboration with the group of Dr. M. Castillejo and Dr. E. Rebollar (IQFR-CSIC) we have proven the feasibility of fabricating LIPSS in the P3HT/PCDTBT (1:1) blend, which can be considered as a model bulk-heterojunction for all-polymer solar cells. In spite of the heterogeneous roughness, due to phase separation in the blend, both P3HT and PCDTBT domains present well-defined LIPSS as well as a synergy for both components in the blend when irradiating at wavelengths of 532 and 266 nm. Both, P3HT and PCDTBT in the blend require lower fluence and less pulses in order to optimize LIPSS morphology than in the case of irradiating the homopolymers separately. Near edge X-ray absorption

fine structure and Raman spectroscopy reveal a good chemical stability of both components in the blend thin films during LIPSS formation. In addition, scanning transmission X-ray spectro-microscopy shows that the mechanisms of LIPSS formation do not induce a further phase segregation neither a mixture of the components. Conducting atomic force microscopy reveals a heterogeneous electrical conductivity for the irradiated homopolymer and for the blend thin films, showing higher electrical conduction in the trenches than in the ridge regions of the LIPSS.



POLYMER MATERIALES OBTAINED FROM: A) PTT AND PTT-PTMO WITH DIFFERENT NANOADDITIVES AND B) RENEWABLE BIO-BASED RESOURCES

We have prepared polymer nanocomposites based on poly(trimethylene terephthalate) (PTT) and poly(trimethylene terephthalate-block-poly(tetramethylene oxide)) (PTT-PTMO) copolymers with nanoadditives such as single and multi-walled carbon nanotubes (SWCNT and MWCNT, respectively), expanded graphite (EG), silicon carbide (SiC), and tungsten (IV) sulfide (WS₂). Samples at different concentrations were obtained and characterized from a morphological and structural point of view. Moreover, their mechanical, thermal (DSC), electrical (BDS) and optical properties have been studied. From the obtained results has been inferred the interest that some of these materials present due to the combination of good electrical and optical properties. On the other hand, new materials, with high biodegradation potential, such as aromatic polyesters based on 2,5-furandicarboxylic acid and cycloaliphatic polyesters based on 1,4-cyclohexanedicarboxylic acid had been synthesized. A study on their properties is carried out.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS (BIOPHYM)

MOLECULAR AND HYDRODYNAMIC PROPERTIES OF HUMAN EPIDERMAL GROWTH FACTOR RECEPTOR HER2 EXTRACELLULAR DOMAIN AND ITS HOMODIMER: EXPERIMENTS AND MULTI-SCALE SIMULATIONS

In a broad range of carcinomas, gene amplification leads to HER2 overexpression, which has been proposed to cause spontaneous dimerization and activation in absence of ligand. This has made HER2 especially attractive as a therapeutic target. In this context, the molecular HER2 homodimerization mechanism still remains elusive. In fact, it has been repeatedly reported that the “back-to-back” HER2 homodimer does not form in solution. Notwithstanding, very recently the crystal structure of the HER2 extracellular domain homodimer as a “back-to-head” interaction has been resolved. Experiments, molecular dynamics simulations and hydrodynamic modeling were used to monitor the transport properties of HER2 extracellular domain in solution. Both the intrinsic viscosity and diffusion coefficient of the HER2 extracellular domain monomer and homodimer were evaluated.

We have detected a certain amount of HER2 extracellular domain homodimer in solution. The combination of experiments and simulations of hydrodynamic properties shows a high degree of molecular flexibility in both systems, which ultimately leads to quite higher values of the intrinsic viscosity and lower values of diffusion coefficient than those corresponding to simple globular proteins of similar molecular mass. This high flexibility obeys to the open conformation of this specific receptor and to the large root mean square fluctuations of the different domains, especially the domain IV due to its hinge movement. In addition, we report that for obtaining the correct values of hydrodynamic constants from the modeling one must consider the glycosylation of the systems.

Conformational features of epidermal growth factor receptors regulate their hydrodynamic properties and also control their activity. Hence, it is essential to understand the dynamics of these systems and the role of specific domains involved. A correlation between receptor dynamics and macroscopic transport properties is highly desirable.

THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF HOMOLOGOUS TETRACYANOBORATE-BASED IONIC LIQUIDS

Thermophysical properties of low-viscosity ionic liquids (ILs) based on the tetracyanoborate ([B(CN)₄]⁻) anion carrying a homologous series of 1-alkyl-3-methylimidazolium ([AMIM]⁺) cations [EMIM]⁺ (ethyl), [BMIM]⁺ (butyl), [HMIM]⁺ (hexyl), [OMIM]⁺ (octyl), and [DMIM]⁺ (decyl) were investigated by experimental methods and molecular dynamics (MD) simulations at atmospheric pressure and various temperatures. This work has been carried out in collaboration with the University of Erlangen-Nuremberg and the National Centre for Scientific Research “Demokritos”. Spectroscopic methods based on nuclear magnetic resonance and surface light scattering were applied to measure the ion self-diffusion coefficients and dynamic viscosity, respectively. In terms of MD simulations, a non-polarizable molecular model for [EMIM][B(CN)₄] developed by optimization to experimental data was transferred to the other homologous ILs.

For the appropriate description of inter- and intramolecular interactions, precise and approximate force fields (FFs) were tested regarding their transferability within the homologous IL series, aiming at reducing the computational effort in molecular simulations. Comparison of the experimental and simulated results for the homologous $[\text{B}(\text{CN})_4]^-$ -based ILs displays good agreement generally within combined uncertainties, which indicates a solid transferability of both FF contributions from shorter to longer alkyl chains for ILs. In fact, only deviations could be observed at the lowest temperatures. This observation suggests that the charges associated with relatively short-chained ILs are transferable to longer-chained homologues without a significant loss in accuracy. The simulations show a nano-segregation in the bulk of the fluid gradually occurring with increasing alkyl chain length in the cation as well as a correlation between self-diffusivity and viscosity, which were both observed for the $[\text{B}(\text{CN})_4]^-$ -based ILs, agree with the findings reported for ILs in literature.

SUPERNUCLEATION AND PLASTICIZATION IN THE CRYSTALLIZATION AND RHEOLOGICAL BEHAVIOR OF BIOPOLYMERS- BASED NANOCOMPOSITES AND NANOHYBRIDS

Nanocomposites are highly attractive materials, as the inclusion of nanofillers in polymers leads to an improvement in several mechanical and electrical properties. Carbon nanotubes (CNT)s are one of the most commonly employed conductive nanofillers, as they have an exceptionally large aspect ratio and low density, which makes them ideal for blending with polymeric materials. In these blends, the obtained materials exhibit a good balance between lightness and outstanding properties, which are ideal for nanotechnology. The nanocomposites of poly(ϵ -caprolactone) (PCL) with CNT have potential applications in the biodegradable packaging market and in the biomedical field since the presence of the CNTs could overcome disadvantages of PCL with respect to mechanical properties and thermal stability. PCL was blended with pristine multiwalled carbon nanotubes (MWCNT) and with a nanohybrid obtained from the same MWCNT but grafted with low molecular weight PCL, employing concentrations of 0.25 to 5 wt % of MWCNT and MWCNT-*g*-PCL. Excellent CNT dispersion was found in all samples leading to supernucleation of both nanofiller types. Nanohybrids with 1 wt % or less MWCNTs crystallize faster than nanocomposites (due to supernucleation), while the trend eventually reverses at higher nanotubes content (because of plasticization). Rheological results show that yield-like behavior develops in both nanocomposites, even for the minimum content of carbon nanotubes. In addition, the MWCNT-*g*-PCL family, when compared with the neat polymer, exhibits lower values of viscosity and modulus in oscillatory shear, and higher compliance in creep. These rheological differences are discussed in terms of the plasticization effect caused by the existence of low molecular weight free and grafted PCL chains in the nanohybrids.

INFLUENCE OF WAVELENGTH ON THE LASER REMOVAL OF LICHENS COLONIZING HERITAGE STONE

Laser irradiation of lichen thalli on heritage stones serves for the control of epilithic and endolithic biological colonizations. We investigate rock samples from two quarries traditionally used as source of monumental stone, sandstone from Valonsadero (Soria, Spain) and granite from Alpedrete (Madrid, Spain), in order to find conditions for efficient laser removal of lichen thalli that ensure preservation of the lithic substrate. A comparative laser cleaning study was carried out with ns Q-switched Nd:YAG laser pulses of 1064 nm (fundamental radiation), 355 nm (3rd harmonic) and 266 nm (4th harmonic) and sequences of IR-UV pulses. Transmission electron microscopy was used to determine the best laser irradiation conditions and to detect possible structural, morphological and chemical changes on the irradiated surfaces with lichen colonization. The results show that the laser treatment does not lead to the complete removal of the studied lichen thalli, although clearly induces substantial damage, in the form of loss of the lichen upper cortex and damage to the algal layer. In the medium term these alterations could result in the destruction of the lichen thalli, thus providing a degree of control of the biodeterioration processes of the lithic substrate and reducing the chances of subsequent lichen recolonization.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

Más allá de campo medio y soluciones exactas en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Code or Reference: FIS2015-63770-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich and Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2016-December 2018.

Objectives: Development and application of new techniques for the solution of many-body quantum systems, including extensions of mean field approaches and exact analytical and numerical solutions.

Quantum information technologies in Madrid+ (QUITEMAD+)

Code or Reference: S2013/ICE-2801.

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

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

Duration: January 2015-December 2018.

Objectives: Quantum computation. Quantum simulation. Quantum cryptography. Quantum sensing. Quantum Artificial Intelligence.

Gravitación y teoría de campos: cuantización, simetría y mecánica estadística.

Code or Reference: FIS2014-57387-C3-3-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor y Jesús Salas Martínez (participation of F. Barbero and J. Margalef).

Duration: January 2015-December 2017.

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

Núcleos exóticos: Estructura, reacciones e implicaciones de interés astrofísico.

Code or Reference: FIS2014-51.971-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido.

Duration: January 2015-December 2018.

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

Universal properties of few-body systems in Nuclear Physics.

Code or Reference: i-LINK1056.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: Study of universal features of open quantum systems.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

Code or Reference: FIS2014-54800-C2-2-P.

Funding Institution: MINECO.

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

Duration: January 2015-December 2018 (extended one year).

Objectives: Analysis of the consequences of Loop Quantum Cosmology and of Group Field Theory for cosmological perturbations. Quantization of spherically symmetric spacetimes and black holes in Loop Quantum Gravity. Study of nonlocal quantum gravity of exponential type as well as in multi-scale spacetimes. Development of approximate and numerical methods in quantum cosmology.

Red Consolider Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear, (CPAN)

Code or Reference: FPA2015-69037-REDC.

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Luis Garrido Beltrán. *At IEM:* Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: Network on Particle Physics, Astroparticles and Nuclear Physics for scientific collaboration, interaction and mobility in Spain.

Caracterización espectroscópica de moléculas prebióticas no-rígidas de importancia astrofísica mediante métodos ab initio altamente correlacionados.*Code or Reference:* FIS2013-40626-P.*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez.*Duration:* January 2014-December 2017.*Objectives:* The study of the far infrared spectra of non-rigid molecules of astrophysical interest using highly correlated ab initio methods.**Caracterización espectroscópica de moléculas prebióticas no-rígidas de importancia astrofísica mediante métodos ab initio altamente correlacionados.***Code or Reference:* FIS2016-76418-P.*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez.*Duration:* January 2017-December 2020.*Objectives:* The study of the far infrared spectra of non-rigid molecules of astrophysical interest using highly correlated ab initio methods.**Anion CosChem Exploring the Chemistry and Spectroscopy of Cosmic Anions.***Code or Reference:* Anion Cos Chem ANR-14-CE33-0013.*Funding Institution:* Agence National de la Recherche ANR (Francia).*Main Researcher:* Ludovic Biennier (Instituto de Física de Universidad de Rennes).*Duration:* 2014-2018.**Acción COST Our Astro-Chemical History.***Code or Reference:* CM1401.*Funding Institution:* COST, UE.*Main Researcher:* L. Wiesenfeld (Observatorio de Grenoble, Francia). *Management committee (Spain):* M.L. Senent, O. Roncero.*Duration:* 2015-2018.**Acción COST Molecules in Motion, MOLIM.***Code or Reference:* CM1405.*Funding Institution:* COST, UE.*Main Researcher:* A.G. Császár (U. Eotvos de Budapest, Hungria). *Management committee (Spain):* M.L. Senent, M.P. de Lara.*Duration:* 2015-2019.**Simulación cuántica de modelos en red con fibras ópticas.***Code or Reference:* FIS2014-61633-EXP.*Funding Institution:* MINECO.*Main Researcher:* Rafael Alejandro Molina Fernández.*Duration:* September 2015-August 2017.*Objectives:* Development and application of new techniques for the solution of many-body quantum systems, including extensions of mean field approaches and exact analytical and numerical solutions.**3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Estudio de la estructura y dinámica de Nucleos exóticos.***Code or Reference:* 201750I037*Funding Institution:* CSIC.*Main Researcher:* María José García Borge.*Duration:* 01 December 2017-30 November 2018.*Objectives:* This grant allows for participation of experiments and workshops waiting for a larger national grant.**Estudios Experimentales de la Estructura Nuclear Exótica.***Code or Reference:* FPA2015-64969-P*Funding Institution:* Ministerio de Economía y Competitividad.*Main Researcher:* Olof Tengblad.

Duration: January 2016-December 2019.

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

European Nuclear Science and Application Research 2.

Code or Reference: 654002

Funding Institution: Comisión Europea.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: March 2016-February 2020.

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

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

Code or Reference: MAT2016-75354-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Duration: January 2017- December 2020.

Project Leader: Carlos Cabrillo García and María Pilar de Lara Castells.

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

Nuclear structure research in exotic nuclei: Experimental and theoretical studies and instrumental developments for AGATA.

Code of Reference: FPA2014-57196-C5-4-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main researcher: Andrea Jungclauss.

Duration: January 2015- December 2017.

Nanobiospectroscopia (Raman y Fluorescencia): Nanosistemas orientados a la biodiagnos y la teranóstica.

Code or Reference: FIS2014-52212-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2015-December 2017.

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

Surface-Enhanced optical analysis base don plasmonic effects of dyes in archaeological textsils of the Chilean Cultural Heritage.

Code or Reference: COOPB20146

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: Characterization of organic pigments in textsils of the Chilean Cultural Heritage by in-situ Surface-enhanced Raman scattering.

Plasmonic-Enhanced Techniques for the Analysis of Organic Colorants in Works of Art.

Code or Reference: iLINK1148

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2017-December 2018.

Objectives: Application of new plasmonic nanostructures in the study of materials of interest for the Cultural Heritage focused on artworks of the Metropolitan Museum of New York and P. Getty Museum of Los Angeles.

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

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2016-December 2018.

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

Síntesis de composites de base cemento ecoeficientes y superaislantes a partir de la valorización de residuos y subproductos con alto contenido de sílice y silico-alúmina.

Code or Reference: BIA2015-65558-C3-1-R

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Moisés Frias Rojas (participation: Sagrario Martínez Ramírez).

Duration: January 2016-December 2018.

Objectives: New materials development with sustainability proposal.

Tecnologías y conservación de materiales del patrimonio. Geomateriales 2.

Code or Reference: S2013/MIT-2914

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid (CAM).

Main Researcher: Rafael Fort (participation: Sagrario Martínez Ramírez).

Duration: October 2014-October 2018.

Objectives: To understand geomaterial alteration processes and mechanisms, developing strategies for their protection and conservation by enhancing their resistance to decay and, consequently, their durability.

Eco cements from waste materials: additive effect on microstructure.

Code or Reference: 2017092394

Funding Institution: Sincrotrón ALBA.

Main Researcher: Lucía Fernández Carrasco.

Duration: 3 April 2017-8 April 2017.

Objectives: Deepen in the paste interaction by using synchrotron radiation infrared microspectroscopy in order to detect the reaction phases in the cement matrix at early ages, the effect of the activator concentration at temperatures up to 40°C.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

NanoScreen: Disruptive portable device for pre-screening of Persistent Organic Pollutants –POPs- in food products and water

Code or Reference: 010103 - 801 - SAF.

Company: SAFTRA Photonis Ltd.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: 2017-2019.

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

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

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

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

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS.

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla.

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

Duration: August 2014-July 2020.

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

Modelos experimentales y teóricos para sistemas astrofísicos y atmosféricos.

Code or Reference: FIS2013-48087-C2-1-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Víctor J. Herrero and Isabel Tanarro.

Duration: January 2014-December 2017.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of ices of astrophysical and atmospheric interest, and more specifically: processing of prebiotic molecules, models for TransNeptunian Objects; plasmas for analogs of interstellar carbonaceous dust, and atmospheric particles of different types.

Hielo, gas y polvo en astrofísica de laboratorio.

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

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

Main Researchers: María Belén Maté and Isabel Tanarro.

Duration: December 2016-December 2020.

Objectives: To provide experimental and theoretical information that can help in the analysis of ices in outer system bodies and in the interstellar medium; generation of carbonaceous residues from the processing of C and H containing ices; characterization of ions and radicals of astrophysical interest by high resolution infrared spectroscopy; diagnostics and kinetic modeling of RF plasmas with astrophysically relevant species; study of analogs of interstellar carbonaceous dust.

Astrophysical ices in the lab.

Code or Reference: i-link 1027

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Main Researchers: Rafael Escribano and Naoki Watanabe.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: To establish a solid link with the ILTS group at Sapporo (Japan), which will enable us to acquire the necessary skills to improve our lab, and to provide ILTS researchers with the theoretical background and experience to incorporate to the theoretical part of their investigations.

Polvo cósmico.

Code or Reference: AYA2015-71975-REDT

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Guillermo Muñoz, Rafael Escribano, Miguel Ángel Satorre and Olga Muñoz.

Duration: December 2015-November 2017.

Objectives: To create a network of 4 Spanish laboratories working on cosmic dust from different points of view and using different and complementary technology. To that aim, several meetings and workshops will be organized.

Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CMST COST Action CM1401

Funding Institution: European Cooperation in Science and Technology.

Main Researchers: Laurent Wiesenfeld.

Spanish delegates: Octavio Roncero and M^a Luisa Senent.

(IEM Participants: José M. Fernández, Isabel Tanarro, Vicente Timón, Belén Maté and Víctor J. Herrero).

Duration: November 2014-November 2018.

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

Code or Reference: PIRSES-GA-2012

Funding Institution: International Research Staff Exchange Scheme, EU Marie Curie Action.

Main Researchers: David. Benoit, María Luisa Senent, Majdi Hochlaf and Najia Komiha.

(IEM Participants: Vicente Timón).

Duration: October 2012-October 2016.

Objectives: Work on the electronic structure calculations necessary to model the adsorption of CO₂ on the Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs) at the atomic level and theoretical study of CO₂ scattering on a liquid-gas interface at the microscopic level.

Experimental study of molecular interactions: water, hydrogen and oxygen.

Code or Reference: FIS2013-48275-C2.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guzmán Tejeda and Salvador Montero.

Duration: January 2014-December 2017.

Objectives: State-to-state rate coefficients for inelastic collisions of H₂O with He and H₂, and of O₂ with He at low temperature, homogeneous clustering of H₂O and O₂.

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Investigación de superficies poliméricas, inorgánicas e híbridas nano y microestructuradas y de sus interacciones: de las bases físico-químicas a sus aplicaciones

Code or Reference: MAT2015-66443-C2-1-R

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Tiberio A Ezquerro.

Duration: January 2016-December 2018.

Objectives: The purpose of the project is to advance in the basic understanding of the physico-chemical bases of confinement produced by different advanced processing techniques involved in the nanotechnology of polymer materials, nanocomposites and hybrid systems and in exploiting the peculiarities of the nanostructure/medium interaction in specific applications involving interaction with a gas/fluid (gas sensors and supercapacitors), with an electric field (ferroelectric memories, functionalelectrodes) or with radiation (photodetectors, phototransducers, photovoltaic heterostructures).

Biofísica estructural de proteínas mediadoras en procesos de transferencia de información a través de la membrana celular.

Code or Reference: PIE201360E097

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: March 2014-June 2017.

Objectives: This project is focussed in the problem of the transfer of chemical information at the interface defined by the cell membrane using the similar methodologies that the used by the group for the study of synthetic macromolecules.

Control of the nanostructure in polymers with applications in energy. Basic implications in their physical properties and their applicability

Code of reference: MAT2014-59187-R

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Aurora Nogales / Mari Cruz García.

Duration: January 2015-December 2017.

Objectives: To obtain deeper knowledge in the understanding of self-assembly phenomena in polymers with potential applications in energy and to control those phenomena in confinement conditions, with the aim of improving their performances.

Propiedades a la nanoescala de nanocompuestos poliméricos jerárquicos basados en grafeno.

Code or Reference: MAT2013-47898-C2-1-R

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Araceli Flores Aguilar-Amat.

Duration: January 2014-December 2016. (Extended to December 2017).

Objectives: Development of new graphene-based polymer nanocomposites with special emphasis in novel hierarchical architectures with improved mechanical properties for their potential application in the transportation industry.

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 Iberoamerican meeting on GMC (*International, non-UE congress*), La Laguna (Spain), 16th-20th of January 2017.

- When continuous meets discrete: quantization of field systems with point-masses (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

The Second General Meeting of the Action (mid term meeting) of the COST CM1401 (*International UE congress*), Faro (Portugal), 16th-20th of January 2017.

- *Weak intramolecular interaction effects on the structure and torsional spectra of ethylene glycol, an astrophysical species* (Contributed talk), M.L. Senent, R. Boussessi, and N. Jaïdane.
- *Ab initio study of the photodissociation of radical molecules of astrochemical interest* (Contributed talk), A. Bouallagui, A. Zanchet, N. Jaïdane, O. Yazidi, M. L. Senent, L. Bañares and A. García-Vela.

Quantum-classical transition in Many-Body Systems: Indistinguishability, Inteference and Interactions (*International non-UE congress*), Dresden (Germany), 13th-17th of February 2017.

- *Quantum fluctuation relations for generalized Gibbs ensemble* (Contributed talk), R.A. Molina.
- *Superradiance at the localization-delocalization crossover in chlorosomes* (Poster), R.A. Molina, E. Benito-Matías.

APS March Meeting 2017 (*International non-UE congress*), New Orleans (USA), 13th-17th of March 2017.

- *Effect of disorder on the critical behavior of interacting 3D Dirac and Weyl semimetals*

International Conference on Theoretical Chemistry and Modelling (*International non-UE congress*), Kenitra (Morocco), 16th-17th of March 2017.

- *Spectroscopy of relevant non-rigid molecules of astrophysical interest* (Invited talk), M.L. Senent.
- *Theoretical Spectroscopic Characterization at low Temperatures of C₂H₃NO and its Isomers* (Invited talk), S.Dalbouha, M.L.Senent, N. Komih, and R. Dominguez.

2^{ème} Congrès de Physique et Chimie Quantique CPCQ2017 (*International non UE congress*), Tizi Ouzou (Argelia), 27th-30th of March 2017.

- *Theoretical spectroscopic characterization of ethylene glycol at low temperatures (Highly correlated ab initio calculations and variational procedure)* (Contributed talk), R. Boussessi, M.L. Senent and N. Jaïdane.

9th Jerte Advanced Relativity Meeting (*Local congress*), Navaconcejo, Cáceres, 28th of April-1st of May 2017.

- *Turning turnips into turnstiles* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- *Finite entanglement entropy in quantum gravity* (Invited talk), Gianluca Calcagni.
- *BUCHO's sound* (Invited talk), Luis J. Garay.
- *Fermions in hybrid cosmology* (Oral contribution), Beatriz Elizaga de Navascués, Guillermo A. Mena Marugán, and M. Martín-Benito.
- *A closer look to initial conditions for cosmological perturbations* (Oral contribution), Daniel Martín de Blas.

Workshop on Theory and applications of RPA and beyond methods in physics and chemistry, Paris (France), 2nd-4th of May 2017.

- *Combining coupled cluster theory and number projected BCS* (Invited talk), J. Dukelsky.

2017 "String Theory & Cosmology" Gordon Research Conference (*Interational non-UE congress*), Barga, Lucca (Italy), 28th of May-2nd of June 2017.

- *Gravitational-wave echoes from microscopic quantum gravity effects* (Invited talk), Luis J. Garay, Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio.

Workshop on Advances in theoretical nuclear physics, (*International non UE congress*), Stockholm (Sweden), 5th-9th of June 2017.

- *Exactly solvable proton-neutron pairing models* (Invited talk), J. Dukelsky.

X Reunión Española de Optoelectrónica Optoel2017 (*National congress*), Santiago de Compostela (Spain), 12th-14th of June 2017.

- *PMMA optical fiber acetone degradation* (Poster), C. Pulido de Torres.

XXV Congreso de ecuaciones diferenciales y aplicaciones/XV Congreso de Matemática Aplicada (*National congress*), Cartagena (Spain), 26th-30th of June 2017.

- *On the realization of limit cycles in planar polynomial system* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

Loops'17 (*International non-UE congress*), Warsaw (Poland), 3rd-7th of July 2017.

- *Fermions in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga de Navascués, and M. Martín-Benito.
- *Hybrid LQC: choice of vacuum state for cosmological perturbations in LQC* (Plenary Talk), Daniel Martín de Blas.

XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (*International non UE congress*), Paris (France), 3rd-7th of July 2017.

- *Spectroscopy of relevant non-rigid molecules of astrophysical interest: ethylene glycol and methyl isocyanate* (Plenary talk), M.L. Senent.

European Physical Society-Conference on High Energy Physics (*International EU congress*), Venice (Italy), 5th-12th of July 2017.

- *Detecting quantum gravity in the sky* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

ICE-4 (*Local congress*), Madrid (Spain), 10th-14th of July 2017.

- *Topological order in the Haldane model with spin-spin on-site interactions* (Poster), A. Rubio.

Summer Institute 2017 (*International non-EU congress*), Fujiyoshida (Japan), 25th-31st of August 2017.

- *Detecting quantum gravity in the sky* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

4th Korea-Japan joint workshop on Dark Energy (*International non-EU congress*), Nagoya (Japan), 28th-30th of August 2017.

- *Detecting quantum gravity in the sky* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

XXIV International Summer School "Nicolás Cabrera" Quantum Transport in Topological Materials (*International non-UE congress*), Miraflores (Spain), 4th-8th of September 2017.

- *Analytical analysis of Fermi Arcs in a slab geometry* (Poster), E. Benito-Matías.
- *Topological order in the Haldane model with spin-spin on-site interactions* (Poster), A. Rubio.

3rd Workshop on Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems, Busteni (Romania), 4th-8th of September 2017.

- *Exactly solvable Richardson-Gaudin models in condensed matter and nuclear physics* (Invited talk), J. Dukelsky.

XXII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications (*UE congress*), Varna (Bulgaria), 10th-16th of September 2017.

- *Weak interaction rates in stellar conditions* (Invited talk), P. Sarriuren.
- *Symmetry energy and its components in finite nuclei* (Invited talk), A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, D.N. Kadrev, P. Sarriuren, E. Moya de Guerra.

Numerical methods for strongly correlated many-body systems (*International non-UE congress*), Munich (Germany), 11th-15th of September 2017.

- *Topological order in the Haldane model with spin-spin on-site interactions* (Poster), A. Rubio.

4th Conference of the Polish Society on Relativity (*International non-UE congress*), Kazimierz Dolny (Poland), 24th-28th of September 2017.

- *Dirac fields in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Plenary talk), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga de Navascués, and M. Martín-Benito.

I Jornadas en Ciencias Naturales y Matemáticas (*International non-UE congress*), Guayaquil (Ecuador), 25th-29th of September 2017.

- *Topological Insulators and Semimetals* (Plenary talk), R.A. Molina.

MOLIM workshop on Intermolecular Interactions (*International UE congress*), Santiago de Compostela (Spain), 2nd-3rd of October 2017.

- *Interaction potential energy surfaces of complexes of relevant astrophysical species and He/H₂* (Invited talk), M.L. Senent, A. Spielfiedel, F. Dumouchel, F. Dayou and N. Feautrier.
- *Ab initio study of the interaction potentials of radical molecules of atmospheric and astrochemical interest* (Invited talk), A. Bouallagui, A. Zanchet, O. Yazidi, N. Jaïdane, L. Bañares, M.L. Senent, and A. García-Vela.

Critical Stability of Quantum Few-body Systems (*International non-UE congress*), Dresden (Germany), 16th-20th of October 2017.

- *Connection between two- and three-body systems in an oscillator trap and d-dimensional calculations* (Invited talk), E. Garrido.

IX CPAN days (*National congress*), Santander (Spain), 23th-25th of October 2017.

- *Why parametrize field theories?* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

I Jornadas de Cálculo Fraccionario (*local congress*), Instituto de Matemática Interdisciplinar (IMI), U. Complutense, Madrid (Spain), 13th-14th of November 2017.

- *Cálculo multi-fraccionario en gravedad cuántica* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

VI Postgraduate meeting on theoretical physics (*National congress*), Valencia (Spain), 29th of November-1st of December 2017.

- *Topology and general relativity, it takes two to tango* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

Recent Developments in Microscopic Theories for Nuclear Structure (Gogny 2017), (*National congress*), Universidad Autónoma de Madrid, Madrid (Spain), 29th of November-1st of December 2017.

- *Mean field uncertainties in Carbon 12 for high precision parity-violating electron scattering measurements* (Oral contribution), O. Moreno.

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

2017 MRS Spring Meeting and Exhibits (*International non-UE congress*), Phoenix, Arizona (USA), 17th-21st of April 2017.

- *Quantum Plasmonic Theory of Small Metallic Chains* (Contributed talk), Jamie Fitzgerald and Vincenzo Giannini.

TECHNART 2017, Non-destructive and Microanalytical Techniques in Art and Cultural Heritage (*International non-UE congress*), Bilbao (Spain), 2nd-6th of May 2017.

- *Preparation of SERS substrates by gel encapsulation of Ag nanoparticles prepared by laser ablation.* (Poster), M.V. Cañamares, M. Oujja, M. Sanz, M. Castillejo, S. Sánchez-Cortés.
- *Investigation of environmental effects on decay of alizarin in egg tempera paints.* (Poster), K. Retko, L. Legan, M. Kavčič, P. Ropret, R. Cerc Korošec, S. Sanchez-Cortes, M.V. Cañamares.

12th International Spring Seminar on Nuclear Physics: Current Problems and Prospects for Nuclear Structure (*International Conference*), Sant'Angelo d'Ischia, Ischia (Italy), 15th-19th of May 2017.

- *Recent results from ISOLDE and HIE-ISOLDE* (Invited talk), M.J.G. Borge

Discussions on Nano&Mesoscopic Optics (DINAMO) (*International non-UE congress*), Siglufjörður (Iceland), 14th-19th of May 2017.

- *Tailoring Bright Fano Resonances in Single High-Refractive-Index Nanorods* (Invited talk), D. R. Abujetas, M. A. G. Mandujano, E. R. Méndez, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Magnetic Light in HRI Metafilms through an Electric and Magnetic Dipole* (Oral Communication), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.

Isospin, STructure, Reactions and energy of Symmetry, ISTROS 2017 (*International non- UE congress*), the Častá-Papiernička Centre, Little Carpathians (Slovakia), 14th-19th of May 2017.

- *Studies of Nuclear Structure at ISOLDE and HIE-ISOLDE* (invited talk), M.J.G. Borge.

Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO 2017) (*International non-UE congress*), San José, California (United States), 14th-19th of May 2017.

- *Amorphous-Crystalline Micro- and Nanostructures in Silicon Fabricated Using Ultrashort Laser Pulses* (Poster), I. Yasser, E. Fuentes, M. García Lechuga, D. Puerto, C. Florian Baron, A. García Leis, S. Sánchez Cortés, J. Solís, J. Siegel.

Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS'2017) (*International non-UE congress*), St. Petersburg (Russia), 22nd-25th of May 2017.

- *Magnetic Light in HRI Metafilms through an Electric and Magnetic Dipole* (Contributed talk), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Directional and Polarized Light Emission at the Nanoscale through Semiconductor Nanowires* (Contributed talk), D. R. Abujetas, A. D. Van Dam, J. Gómez Rivas, and J. A. Sánchez-Gil.

Advances in Radioactive Isotope Science, ARIS 2017 (*International non-UE congress*), Keystone, Colorado (USA), 28th of May – 2nd of June 2017.

- *The ISOLDE Facility and the HIE-ISOLDE Project, Recent Results* (contributed talk), M. J. G. Borge.

1st Journal of Thermal Analysis and Calorimetry Conference-6th V4 Thermoanalytical Conference (*International non-UE congress*), Budapest (Hungria), 6th-9th of June 2017.

- *The influence of zinc oxide on the reactividad and development of hydration heat in coal mining waste based mortars* (Oral presentation), M. Frías, S. Martínez-Ramírez, R. García, R. Vigil, I. Vegas, L. Fernández.
- *Thermal analysis study of the activation process of coal mining waste for the manufacture of future eco-cements* (Poster), S. Martínez-Ramírez, M. Frías R. García, R. Vigil, I. Vegas, L. Fernández.

Conference on Quantum Fluid Clusters 2017 (*International non-UE congress*), Obergurgl (Austria), 7th-9th of June 2017.

- *Ab-initio-Driven Atomistic Simulations of the Deposition and Aggregation of Nanoscale Metal Particles on Carbon-Based Surfaces at Room Temperature* (Oral contribution), R. Fernandez-Perea, L.F. Gómez, M. Pi, C. Cabrillo, A.F. Vilesov, M.P. de Lara-Castells.

XVI International Clay Conference (*International congress*), Granada (Spain), 11th-21st of July 2017.

- *Activation effects of phyllosilicates in clay mineral based waste for use supplementary cementitious materials* (Poster), R. Vigil De La Villa, R. García-Giménez, M. Frías, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco, I. Vegas.

OPTOEL17, (*National congress*), Santiago de Compostela (Spain), 12th-14th of July 2017.

- *Directional and Polarized Light Emission at the Nanoscale through Semiconductor Nanowires* (Poster), J. A. Sánchez-Gil, D. R. Abujetas and J. Gómez Rivas.
- *Magnetic light on HRI metafilms through an electric and magnetic dipole* (Poster), D. R. Abujetas, J. A. Sánchez-Gil and J. J. Sáenz.

XXXVI Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Física (*National congress*), Santiago de Compostela, A Coruña (Spain), 17th-21st of July 2017.

- *Highlights of the ISOLDE Facility and the HIE-ISOLDE Project* (Invited talk), M. J. G. Borge.

1^{er} Seminario Internacional de Arqueometría, Materialidad y Conservación (*International non-UE congress*), Santiago de Chile, 9th-11th of August 2017.

- *Exploración no invasiva Raman y SERS de colorantes orgánicos en objetos artísticos: estrategias y futuro* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.

XXVI International Materials Research Sciences (*International non-UE congress*), Cancún (Mexico), 20th-25th of August 2017.

- *Sensitive In-situ Raman Detection of Organic Dyes on Artistic Objects by Deposited or Laser Photoinduced Plasmonic Silver Nanoparticles* (Invited Talk), S. Sanchez-Cortes and M. V. Cañamares.

17th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules (*International non-UE congress*), Amsterdam (Netherlands), 11th-14th of September 2017.

- *Interaction of peptides with plasmonic nanoparticles explored with surface-enhanced optical techniques* (Poster), S. Sanchez-Cortes, A. Garcia-Leis, N. Prendiville, B. Hernandez, M. Ghomi.

MAGISOL Meeting 2017 (*International non-UE congress*), CERN, Geneva (Switzerland), 20th-21st of September 2017.

- *The R3B experiment at GSI-FAIR / MAGISOL setups at IDS and SEC* (Talk) O. Tengblad.
- *Multi-particle emission from ³¹Ar at IDS* (Oral contribution), I. Marroquin.
- *Electron capture of ⁸B into highly excited states of ⁸Be* (Oral contribution) S. Viñals.

10th ACI/RILEM International Conference on Cementitious Materials and Alternative Binders for Sustainable Concrete (*International non-UE congress*), Montreal (Canada), 2nd-4th of October 2017.

- *Advances in the combined effect of activation for kaolinite based waste as supplementary cementitious materials* (Oral presentation), M. Frías, R. García, R. Vigil, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco, I. Vegas.

Molim Workshop on Intermolecular Interactions (*UE congress*), Santiago de Compostela (Spain), 2nd-4th of October 2017.

- *Helium Droplet-Mediated Deposition and Aggregation of Nanoscale Silver Clusters on Carbon Surfaces* (Poster), R. Fernandez-Perea, L.F. Gómez, C. Cabrillo, M. Pi, A.O. Mitrushchenkov, A.F. Vilesov, M.P. de Lara-Castells.

LX Congreso Nacional de Física de la Sociedad Mexicana de Física (*National Conference*), Monterrey (Mexico), 8th-13th of October 2017.

- *El núcleo: cien años de sorpresas y beneficios para la sociedad* (Plenary talk), M. J. G. Borge.

I Annual Meeting CINBIO (*International non-UE congress*), Vigo (Spain), 17th-18th of October 2017.

- *Nanofabrication, Functionalization and Application of Plasmonic Nanostructures in Optical Spectroscopy* (Invited Lecture), S. Sánchez-Cortés.

IX CPAN DAYS 2017 – Encuentros de Física Nuclear (*National congress*), Santander, 23rd-25th of October 2017.

- *Multi-particle emission from ^{31}Ar at IDS* (Oral contribution), I. Marroquín, O. Tengblad, E. Nácher, A. Perea and Magisol collaboration.

Physics Cases and Instrumentation for the EURISOL-DF, next step towards Eurisol (*International UE congress*), Lisbon (Portugal), 15th-16th of November 2017.

- *Light Nuclei Challenges and Experimental Tools* (Contributed talk), M. J. G. Borge

1st International Conference on Radiations and Applications, ICRA'17 (*International non-UE congress*), Algiers, (Algeria), 20th-23rd of November 2017.

- *Results from ISOLDE and the HIE-ISOLDE Project* (Keynote/Plenary talk), M. J. G. Borge.

17th International Conference Non-conventional Materials and Technology 2017 (*International non-UE congress*), Mérida, Yucatán (Mexico), 26th-29th of November 2017.

- *Binary cements with high coal waste contents: properties and behaviour against CO₂* (Oral presentation), M. Frías, L. García, L. Caneda-Martínez, M.I. Sánchez De Rojas, R. García, R. Vigil, I. Vegas, S. Martínez-Ramírez.

ISOLDE Physics Workshop and Users Meeting 2017 (*International non-UE congress*), CERN, Geneva (Switzerland), 4th-6th of December 2017.

- *Study of β -delayed proton decays at IDS: the cases of ^{33}Ar and ^{31}Ar* (Oral contribution), I. Marroquin.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

The Astrochemical Week, COST Action CM1401 (*International, EU congress*), Faro- (Portugal) 16th-20th of January 2017.

- *Interstellar carbonaceous dust and methane- water ice theoretical DFT structure and infrared spectroscopy* (Oral contribution), Vicente Timón, Germán Molpeceres, Miguel Jiménez-Redondo, Rafael Escribano, Belén Maté, Miguel Angel Moreno, Isabel Tanarro and Víctor J. Herrero.

ICSS & EMN Nanoparticles (*International, EU congress*), San Sebastian (Spain), 9th-13th of May 2017.

- *Plasmonic diffractive patterns in metallic thin films by laser interference* (Invited lecture), R. J. Peláez, A. Ferrero.

The 1st Meeting Asian Workshop on Molecular Spectroscopy (*International, EU congress*), Kyoto (Japan), 20th-21st of May 2017.

- *Variation of H-bond properties with density in astrophysical ice structures* (Oral contribution), R. Escribano, P.C. Gómez, V.J. Herrero, and N. Watanabe.

V Reunión de Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar (CPESS5) (*National, Spain*), Villanueva de la Cañada (Spain), 6th-8th of June 2017.

- *Tentative theoretical structure and infrared spectra of methyl isocyanate ice.* (Poster) Vicente Timón, Germán Molpeceres, Belén Maté, Víctor J. Herrero, Rafael Escribano, Isabel Tanarro, and Miguel Ángel Moreno.

Workshop Formation and Processing of Cosmic Dust Analogues (*International, EU congress*), Toulouse (France) 12th-13th of June, 2017.

- *RF plasma production and electron processing of interstellar carbonaceous dust analogs.* (Poster) R. J. Peláez, I. Tanarro, V. J. Herrero, B. Maté, G. Molpeceres, V. Timón, R. Escribano, and M. Jiménez-Redondo.

- *Dust seed formation using an adjustable multi-magnetron gas aggregation source* (Poster) L. Martínez, K. Lauwaet, G. Santoro, J. Sobrado, R. Peláez, I. Tanarro, C. Joblin, J. Cernicharo, Y. Huttel, J.A. Martín-Gago.
- *The gas evolution chamber coupled to radio astronomical receivers* (Poster), E. Moreno, G. Santoro, K. Lauwaet, R. J. Peláez, I. Tanarro, V.J. Herrero, J. L. Doménech, J., Sobrado, P. de Vicente, F. Tercero, A. Díaz, J. D. Gallego, J. A. López Pérez, J. A. López Fernández, J. R. Pardo, J. A. Martín-Gago, and J. Cernicharo.

International Symposium on Molecular Spectroscopy, 72nd Meeting (*International non-UE congress*), Champaign-Urbana, (Illinois, USA) 19th-23rd of June 2017.

- *The high resolution vibration-rotation spectrum of SiH⁺* (Oral presentation), José L. Doménech.

XXXVI Biennial Meeting – Spanish Royal Society of Chemistry (*International, EU congress*), Sitges (Spain), 25th-29th of June, 2017.

- *Quantum chemical study of the formation of interstellar water over dust grain surfaces* (Flash presentation), Molpeceres, G., Rimola, A.

XXXIII International Conference on Phenomena of Ionized Gases (ICPIG) (*International congress*), Estoril/Lisbon (Portugal), 9th-14th of July 2017.

- *Plasma generation and processing of interstellar carbonaceous dust analogs* (Invited Lecture), V. J. Herrero, I. Tanarro, B. Maté, R. J. Peláez, G. Molpeceres, V. Timón, R. Escribano, and M. Jiménez-Redondo.
- *Astronomical radio-reception techniques for emission spectroscopy of molecular and short lived species in cold plasmas* (Poster), I. Tanarro, B. Alemán, R. J. Peláez, V. J. Herrero, J. L. Doménech, P. de Vicente, J. D. Gallego, J. R. Pardo, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, and J. Cernicharo.
- *High resolution infrared spectroscopy of ions of astrophysical interest: H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺, investigated in a cold plasma.* (Poster), J. L. Doménech, I. Tanarro, Brian Drouin P, V. J. Herrero, and J. Cernicharo.

XXXVI Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Física (*National, Spain*), Santiago de Compostela (Spain), 17th-21st of July 2017.

- *Astronomical radio-reception techniques for emission spectroscopy of molecular and short lived species in cold plasmas.* (Poster) I. Tanarro, B. Alemán, R. J. Peláez, V. J. Herrero, J. L. Doménech, P. de Vicente, J. D. Gallego, J. R. Pardo, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, and J. Cernicharo.
- *High resolution infrared spectroscopy of ions of astrophysical interest: H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺, investigated in a cold plasma.* (Poster) J. L. Doménech, I. Tanarro, Brian Drouin P, V. J. Herrero, and J. Cernicharo.
- *Plasma generation and high energy electron processing of interstellar carbonaceous dust analogs* (Poster), I. Tanarro, V. J. Herrero, B. Maté, R. J. Peláez, G. Molpeceres, V. Timón, R. Escribano, and M. Jiménez-Redondo
- *Laboratory study of inelastic collisions of O₂ with He at low temperature* (Oral contribution), F. Gámez, E. Moreno, G. Tejada, M. I. Hernández, S. Montero, J. M. Fernández

16th International Clay Conference: Clays, from the Oceans to Space, ICC-2017 (*International non-EU congress*), Sociedad Española de Arcillas (SEA), Granada (Spain), 17th-21st of July 2017.

- *Uranophane – A layered uranyl silicate mineral. A computational DFT study of its structural, mechanical and vibrational properties* (Oral contribution), Francisco Colmenero, Vicente Timón, Laura. J. Bonales, Joaquín Cobos.

The 25th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy HRMS 2017 (*International non-EU congress*), Helsinki (Finland) 20th-25th August 2017.

- *Collisional broadenings and shifts in the S(0) and S(1) rotational lines of D₂-He at 77K.* (Poster), Dionisio Bermejo, Raúl Martínez and Franck Thibault.
- *Stimulated Raman spectrum of ¹³CF₄.* (Poster), Dionisio Bermejo, Raúl Martínez, and Vincent Boudon

16th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration-2017 (*International non-EU congress*), AMPHOS 21 (Scientific and Strategic Environmental Consulting), Barcelona (Spain), 10th-15th of September 2017.

- *Study of the thermal stability of studtite by in situ Raman spectroscopy and DFT calculations* (Poster), Joaquín Cobos, Francisco Colmenero, Laura. J. Bonales, Vicente Timón.

IBER 2017 (*International, EU congress*), Barcelona (Spain), 12th-14th of September 2017.

- *Methyl isocyanate ices. Solid-phase infrared spectroscopy and energetic processing of a newly discovered astrophysical molecule* (Poster), V. J. Herrero, B. Maté, G. Molpeceres, V. Timón, I. Tanarro, E. Escribano, R. Peláez, J. C. Guillemin, and J. Cernicharo.
- *Silicate mediated interstellar water formation: A theoretical study* (Poster), Molpeceres G., Enrique-Romero J., Maté B., and Rimola. A.
- *Laboratory simulations os astrophysical ices* (invited lecture) Belén Maté

Dust and Ice Particles Spectroscopy and Scattering (*International, EU congress*), Granada (Spain), 25th-28th of September 2017.

- *Recent experiments at IEM Ice lab* (Oral contribution), Belén Maté.
- *A tentative ab initio structures study of methanetiol crystalline and amorphous ices* (Oral contribution), Vicente Timón.
- *Silicate mediated interstellar water formation: A theoretical study* (Oral contribution), G. Molpeceres.

X Iberian Vacuum Conference, RIVA (*International, EU congress*), Bilbao (Spain), 4th-6th of October 2017.

- *Structure and energetic processing of interstellar hydrocarbon dust analogs formed by plasma deposition* (Poster), V. J. Herrero, I. Tanarro, R. J. Peláez, B. Maté, G. Molpeceres, V. Timón, R. Escribano, and M. Jiménez-Redondo.

Our Astro-Chemical History (*International EU congress*), Ciudad Real (Spain), 11th-13th of December 2017.

- *Infrared spectroscopy of Pluto's surface ice models* (Oral contribution) R. Escribano.
- *CH₃NCO ices: infrared spectroscopy and energetic processing* (Oral contribution), Belén Maté.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

2017 APS March Meeting (*International Non-UE congress*), New Orleans (USA), 13th-18th of March 2017

- *Fabrication of laser induced periodic surface structures on P3HT/ PC71BM photovoltaic blends grooves* (Oral contribution), J. Cui, A. Rodríguez-Rodríguez, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M. Castillejo, E. Rebollar, T. A. Ezquerra.
- *Polymer crystallization in gratings prepared by Nanoimprint Lithography as revealed by Atomic Force Microscopy and Grazing Incidence X-ray Scattering* (Oral contribution), M. Soccio, M. C. García-Gutiérrez, D. E. Martínez-Tong, N. Alayo, F. Pérez-Murano, N. Lotti, A. Munari, T. A. Ezquerra.
- *Polymer Crystallization in Nanoparticles* (Oral contribution), Aurora Nogales, Jing Cui, Daniel Martínez Tong, Tiberio T. A Ezquerra.
- *Functional Polymer Crystallization in Cylindrical Pores*. (Oral contribution) Aurora Nogales, Jaime Martín.
- *Breath figures of P3HT and of its photovoltaics blend with PC71BM*. (Oral contribution), Aurora Nogales, Jing Cui, Esther Rebollar, Adolfo del Campo, Mircea Cotlet, Juan Rodríguez Hernández.

4° Workshop sobre Microscopia Raman Confocal (*National Congress*), Madrid (Spain), 26th-28th of April 2017.

- *Modification of poly(dimethylsiloxane) as a basis for surface wrinkle formation: Chemical and mechanical characterization* (Invited talk), Aurora Nogales.

Fifth International Symposium Frontiers in Polymer Science (*International non-UE congress*), Sevilla (Spain), 17th-19th of May 2017.

- *Structure and morphology of ethylene/1-hexene and ethylene/styrene single crystals* (Poster), J. Martínez-Salazar, A.J. Müller, V. Souza-Egipsy and J.F. Vega.
- *Indentation study on the reinforcement of graphene in polyethylene nanocomposites: from macro to nanomechanical properties* (Poster), Fernando Ania, Araceli Flores, Horacio J. Salavagione, Gary Ellis and Marián A. Gómez-Fatou.
- *Stabilization of mechanical properties of polyvinyl(alcohol) against moisture by incorporation of graphene* (Poster), Araceli Flores, Horacio J. Salavagione, Fernando Ania, Gerardo Martínez, Gary Ellis and Marián A. Gómez-Fatou.
- *Nanoindentation and AFM studies on a poly(3-hydroxybutyrate-co-hydroxyvalerate) (P3HB-co-3HV) banded spherulite* (Poster), Patricia Enrique-Jiménez, Juan F. Vega, Javier Martínez-Salazar, Fernando Ania and Araceli Flores.
- *Nanocomposites of thermoplastic polymers with graphene* (Poster), Horacio J. Salavagione, Susana Quiles-Díaz, Patricia Enrique-Jiménez, Araceli Flores, Fernando Ania and Marián A. Gómez-Fatou.

E-MRS Spring Meeting (*UE congress*), Strasbourg (France), 22nd-27th May 2017.

- *Functional Nanostructured Surfaces Induced by Laser Irradiation on Fullerene Materials* (Invited Talk), E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, E. Rebollar
- *Laser induced periodic Surface structures on polymer nanocomposites with carbon nanoadditives*. (Poster), R.I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernandez, T.A. Ezquerra, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Rosłaniec, M. Castillejo, P. Moreno, E. Rebollar.
- *Thermal Conductivity of Polycarbonate: The effect of ordered nanostructuring* (Oral contribution), Pedro Campos, Liliana Vera, Ruy Sanz, Aurora Nogales, Marisol Martín.

International Conference in Organic Electronics (International Non-UE congress), Saint Petersburg, 4th-8th June 2017.

- *Nanopatterning conjugated polymers by laser: Influence on electrical properties* (Oral contribution), A. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, T.A. Ezquerra, M.C. García-Gutiérrez.

XII Congreso Nacional de Materiales Compuestos: MATCOMP 2017 (National), San Sebastián (Spain), 21st-23rd of June 2017.

- *Estudio de la nanoestructura y las propiedades mecánicas locales de materiales multifuncionales de polipropileno* (Oral contribution), Patricia Enrique-Jiménez, Fernando Ania, Araceli Flores, Susana Quiles, Horacio J. Salavagione and Marián A. Gómez-Fatou.

16th EPF European Polymer Congress (UE), Lyon (France), 2nd-7th of July 2017.

- *Nanomechanical and AFM characterization of P3HB-co-3HV spherulites* (Oral contribution), Patricia Enrique-Jiménez, Juan F. Vega, Javier Martínez-Salazar, Fernando. Ania and Araceli Flores
- *Structure and properties of new conductive elastomers based on SEBS and graphene* (Oral contribution), Araceli Flores, Horacio J. Salavagione, Patricia Enrique-Jiménez, Susana Quiles-Díaz, Gerardo Martínez, Fernando Ania and Marián A. Gómez-Fatou.

8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (International non-UE congress), Wisła (Poland), 23rd-28th of July 2017.

- *Self-Confined Dynamics in supercooled Isopropanol during crystallization as revealed by quasielastic neutron scattering methods* (Invited talk), A. Sanz, M. Jiménez-Ruiz, A. Nogales, I. Šics, T. A. Ezquerra.

International Conference on Laser Ablation (COLA 2017) (International non-UE congress), Marseille (France) 3rd-8th September 2017.

- *Femtosecond laser fabrication of periodic nanostructures in polymeric surfaces reinforced by carbon nanoadditives* (Poster), R.I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernandez, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, T.A. Ezquerra, M. Castillejo, P. Moreno, E. Rebollar.

EUROMAT 2017 (UE congress), Thessaloniki (Greece), 17th-22nd of September 2017.

- *Ferroelectric Polymer Nanostructures Induced By Laser Pulsed Irradiation* (Highlight Oral Contribution), Esther Rebollar, Jing Cui, Margarita Hernández, Álvaro Rodríguez, Mari Cruz García Gutiérrez, Tiberio A. Ezquerra, Aurora Nogales.

VIII AUSE Congress and III ALBA User's MEETING (National congress), Madrid, Spain, 9th-11th of October 2017. Chaired by Mari Cruz García Gutiérrez.

- *Nanophase Separation in Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Bulk Heterogeneous Photovoltaic Thin Films as Revealed by Resonant Soft X-ray Scattering* (Oral Contribution), A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerra, M.A. Brady, C. Wang, E. Rebollar.
- *Self-assembly of block copolymer thin films as revealed by GISAXS* (Oral Contribution), J. Fraxedas, L. Evangelio, M. Fernández-Regúlez, S. Gottlieb, G. Rius, F. Pérez-Murano, H. Amenitsch, E. Gutiérrez, A. Nogales, M. C. García-Gutiérrez and T. Ezquerra.
- *Chain orientation in bulk heterojunction photovoltaic thin films as revealed by Near Edge X-Ray Absorption Fine Structure* (Poster), E. Gutiérrez, Á. Rodríguez-Rodríguez, T.A. Ezquerra, E. Rebollar, M. Valvidares, P. Gargiani, M.C. García-Gutiérrez.

7th Spanish Workshop in Nanolithography (Nanolito 2017) (National congress), Madrid, Spain, 23rd-25th of October 2017.

- *Nanofabrication of functional polymer gratings by Laser Induced Periodic Surface Structures as revealed by Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering* (Oral contribution), E. Rebollar, Á. Rodríguez-Rodríguez, E. Gutiérrez, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Cirera, I.A. Gabaldón, A. Varea, A. Vilà, T.A. Ezquerra.
- *Synchrotron radiation based techniques for confinement and nanostructures investigation* (Oral contribution), Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Tiberio A. Ezquerra, Esther Rebollar, Jaime J. Hernández, Inés Puente-Orench and Mari-Cruz García-Gutiérrez.

7th Annual World Congress of Nano Science & Techonology, (International non-UE), Fukuoka (Japón), October 24th-26th, 2017.

- *Induced Arrangement of P3HT:PCBM Layer for Printed Electronics* (Poster), I.A. Gabaldón-Saucedo, A. Varea, E. Gutiérrez, M.C. García-Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Nogales, E. Rebollar, T.A. Ezquerra, A. Cirera, A. Vilà.

II Seminario de Jóvenes Investigadores en Polímeros (SEJIPOL2017) (*National congress*), Madrid, Spain, 31 of October 2017.

- *Nanostructuring of PEDOT:PSS thin films by Laser Methods* (Oral Contribution), E. Gutiérrez, I.A. Gabaldón, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Cirera, A. Varea, A. Vilà, T.A. Ezquerra, E. Rebollar.

VIII AUSE Congress and III ALBA User's Meeting (*National congress*), Madrid (Spain), 9th-11th of October 2017.

- *The role of polymer brushes attached to graphene in the structure of SEBS nanocomposites* (Poster), Patricia Enrique-Jiménez, Susana Quiles, Horacio J. Salavagione, Marián A. Gómez-Fatou, Fernando Ania and Araceli Flores.
- *Correlation between nanostructure and electrical properties in SEBS nanocomposites incorporating graphene modified with polyethylene brushes* (Poster), Susana Quiles-Díaz, Patricia Enrique-Jiménez, Horacio J. Salavagione, Araceli Flores, Fernando Ania and Marián A. Gómez-Fatou.
- *Application of synchrotron infrared micro-reflectance for the study of diverse materials* (Poster), Eduin I. González-Castillo, Peter S. Shuttleworth, Susana Quiles-Díaz, Patricia Enrique-Jiménez, Araceli Flores, Fernando Ania, Horacio J. Salavagione, Marián A. Gómez-Fatou, Ibraheem Yousef, Martin Kreuzer and Gary Ellis.

25th POLYCHAR 2017: World Forum on Advanced Materials (*International non-UE*), Kuala Lumpur (Malaysia), 9th-13th of October 2017.

- *Nanoindentation in graphene reinforced polymers* (Invited lecture), Araceli Flores, Horacio J. Salavagione, Patricia Enrique-Jiménez, Susana Quiles, Daniel Wesner, Holger Schönherr, Marián A. Gómez-Fatou and Fernando Ania.

Ultrafast Science & Technology (*National congress*), Salamanca, Spain, 22nd-24th of November 2017.

- *Femtosecond laser fabrication of periodic nanostructures on polymers and on their composites with carbon nanoadditives* (Oral Contribution), R.I. Rodríguez-Beltrán, T.A. Ezquerra, M. Castillejo, P. Moreno, E. Rebollar.

3rd NANO-meets-SOFT Meeting (*National congress*), IEM-CSIC, Madrid, Spain, 15th of December 2017.

- *Confinement effects on PBTTT/PCBM nanoarrays as revealed by X-ray microdiffraction* (Oral presentation), M.C. García Gutiérrez.
- *Complex surface periodic nanostructures in polymers obtained by nanosecond pulsed laser irradiation* (Oral contribution), A. Nogales.
- *Superficial structuring of PEDOT:PSS thin films: effect on morphological and electrical properties* (Oral contribution), E. Gutiérrez.

4.2 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **D. Hove**, Aarhus University, Denmark, 1st of September 2016-1st of February 2017.
- ❖ **Prof. A.N. Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 5th-12th of June 2017.
- ❖ **Prof. D.N. Kadrev**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 5th-12th of June 2017.
- ❖ **Profa. Alicia M. Sintés Olives**, Univ. Illes Balears, Palma de Mallorca, 8th-9th of June 2017.
- ❖ **Prof. J.A. Caballero**, Universidad de Sevilla, 9th-11th of June 2017.
- ❖ **Prof. Rodolfo Gambini**, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 25th of June-2nd of July 2017.
- ❖ **Prof. B. Kerkeni**, University Tunis el manar, Tunisia, 3rd-18th of September 2017.
- ❖ **Profa. Ana Achúcarro**, Lorentz Center, Leiden University, Leiden, Holland, 25th-27th of November 2017.

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

- ❖ **Dr. Hilde de Vitt**, Karholike Universiteit, Leuven, Belgium, 23rd-27th of January 2017.
- ❖ **Dr. Kseniia Rezyunkina**, Karholike Universitet, Leuven, Belgium, 23rd-27th of January 2017.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 17th- 20th of April, 10th-14th of September 2017.
- ❖ **Mr. Camilo Segura**, Predoctoral Student, Universidad de Chile, Chile, 30th of April- 31st of August 2017.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Associated Professor, Université Paris 13, Paris, France, 1st-5th of June 2017.

- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, Full Professor, Université Paris 13, Paris, France, 1st-5th of June 2017.
- ❖ **Mr. Jaime Arana**, High School student in educational stay, Instituto Alemán de Madrid, 17th-31st of July 2017.
- ❖ **Dr. Freddy Celis**, Associated Professor, Universidad de Chile, Santiago de Chile, 18th of July-4th of August 2017.
- ❖ **Prof. Marcelo Campos Vallette**, Full Professor, Universidad de Chile, Santiago de Chile, 18th of July-4th of August 2017.
- ❖ **Mr. Evandro Ivanov**, Predoctoral student, Universidad de Sao Paulo, Brazil, 1st of September-30th of November 2017.
- ❖ **Dr. Federica Pozzi**, Associate Research Scientist, The Metropolitan Museum of Art of New York, New York, USA, 1st-8th of October 2017.
- ❖ **Maria Angélica García Bucio**, Predoctoral Student, LANCIC - Laboratorio Nacional de Ciencias para la Investigación y Conservación del Patrimonio Cultural, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 18th-23rd of October 2017.
- ❖ **Dr. Marco Leona**, David H. Koch Scientist in charge, The Metropolitan Museum of Art of New York, New York, USA, 23rd-30th of October 2017.
- ❖ **Prof. Bousselham Samoudi**, École Nationale des Sciences Appliquées de Safi, Université Cady Ayyad Marrakech, Morocco, 18th-27th of November 2017.
- ❖ **Dr. Luis Acosta**, Universidad de Ciudad de Mexico, Mexico, 18th-21st of December 2017.

4.2.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Ángel Gutiérrez**, Universidad Tecnológica de Altamira, Mexico., 1st of May-1st of July 2017.
- ❖ **Denisse Moctezuma**, Universidad Tecnológica de Altamira, Mexico., 1st of May-31st of July 2017.

4.3 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Profa. Alicia M. Sintés Olives.

Univ. Illes Balears, Palma de Mallorca

Ondas gravitacionales: ¿así suena el Universo... por fin!

Ciclo oficial de coloquios del IEM.

9th of June 2017.

Profa. Ana Achúcarro.

Lorentz Center, Leiden University, Leiden, Holland.

Observar el Big Bang.

Ciclo oficial de coloquios del IEM.

27th of November 2017.

Prof. J. Ignacio Cirac Sasturain.

Max Planck Institute for Quantum Optics, Garching, Germany.

Ciencia y tecnologías cuánticas de la información.

Ciclo de coloquios Marie S. Curie.

12th of December 2017.

“De Madrid al Cosmos”—Joint Seminar with Universidad Complutense

Dr. Tomi Koivisto.

Coincident General Relativity.

Nordita.

21st of December 2017.

Dr. José L.F. Barbón.

Computational Complexity and Holography.

IFT, UAM-CSIC.

30th of November 2017.

Dr. Felipe J. Llanes Estrada.

Gravitational waves. What's in for hadron physics?
Universidad Complutense de Madrid.
16th of November 2017.

Dra. Ruth Lazkoz.

Forecast and analysis of the cosmological redshift drift.
Universidad del País Vasco (UPV/EHU).
19th of October 2017.

Dr. José Beltrán.

Early Universe with a Born-Infeld taste.
IFT, UAM-CSIC.
5th of October 2017.

Prof. Matt Visser.

Lorentz invariance and the zero-point stress-energy.
Victoria University of Wellington, New Zealand.
29th of June 2017.

Dr. Paco Navarro.

Properties of Rotating Black Holes in Odd Dimensions.
Universidad Complutense de Madrid.
22nd of June 2017.

Dra. Mariam Bouhmadi López.

The smooth and clumpy universe: present and asymptotic behaviour(s).
Universidad del País Vasco (UPV/EHU).
15th of June 2017.

Dr. Michele Arzano.

Deformed relativistic symmetries: Decoherence and dimensional reduction at the Planck scale.
Sapienza - University of Rome, Italy.
8th of June 2017.

Dr. Savvas Nesseris.

Tension and constraints on modified gravity parametrizations of $G_{\text{eff}}(z)$ from growth rate and Planck data.
IFT, UNAM-CSIC.
1st of June 2017.

D. Miguel Aparicio Resco.

Mapas de Galaxias Modernos, Espectros de Potencias de Galaxias y Forecast.
Universidad Complutense de Madrid.
27th of April 2017.

Dr. Miguel Zumalacarregui.

Gravity at the horizon: new probes of gravity and cosmic acceleration.
Nordita/UC Berkeley.
30th of March 2017.

Prof. Luis Manuel González Romero.

Relaciones universales I-LOVE-QNM para modos cuasi-normales de estrellas de neutrones que contienen materia exótica.
Universidad Complutense de Madrid.
16th of March 2017.

D. José de Ramón Rivera.

Unruh-deWitt detectors: The Unruh effect and beyond.
Universidad Complutense de Madrid
26th of January 2017.

Dr. Breno Loureiro Giacchini.*Low-energy effects in super-renormalizable gravity models.*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Brazil.

12th of January 2017.**4.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Dr. Federica Pozzi**

The Metropolitan Museum of Art of New York, USA.

*Characterization of Pigments in Artworks of the Metropolitan Museum.*5th of October 2017.**Dr. Marco Leona**

The Metropolitan Museum of Art of New York, USA.

*The Cultural Meanings of Color: Raman Spectroscopic Studies of Red, Pink and Purple Dyes in Late Edo and Early Meiji Period Japanese Woodblock Prints.*27th of October 2017.**Dr. Luis Acosta**

Universidad de Ciudad de México, Mexico.

*Dispersión del skin ⁸He en torno a la barrera y otros estudios experimentales.*19th of December 2017.**4.3.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Dra. Gema Martínez Criado**

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM)

Exploring materials with hard X-ray nanobeams

13th of March 2017.**Dr. Krzysztof Moorthi**

Mitsui Chemicals, Inc. (Japan).

Effect of stacking Interactions and conformational changes on polarizability of some polymers

8th of September 2017.**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****Jesús Fernando Barbero González.**

- Institut für Theoretische Physik, FAU University, Erlangen (Germany), 11th-14th of December 2017.

Eduardo Garrido Bellido.

- Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Sao José dos Campos (Brazil), 11th-29th of March 2017.
- Institute of Physics and Astronomy, Aarhus University (Denmark), 28th of November-6th of December 2017.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Department of Physics, Oxford University, Oxford (UK), 20th-24th of March 2017.
- Max-Planck-Institut für Physik-Komplexer-Systeme, Dresden (Germany), 19th of July 2017-13th of August 2017.

Gianluca Calcagni.

- University of Fudan, Shanghai (China), 10th-17th of June 2017.
- SUSTech, Shenzhen (China), 18th-30th of June 2017.
- University of Nagoya (Japan), 27th of August-5th of September 2017.

Luis J. Garay Elizondo.

- Institute of Quantum Computing, University of Waterloo, Ontario (Canada), 20th of August-8th of September 2017.
- Charles University, Prague (Czech Republic), 14th-20th of June 2017.

Juan Margalef Bentabol.

- Institut für Theoretische Physik, FAU University, Erlangen (Germany). April-June 2017.

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

María José García Borge.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 10th-29th of August 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 19th -28th of October 2017.

Olof Tengblad.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 1st of February-1st of June 2017.

Santiago Sánchez Cortés.

- Department of Biophysics, University “P. J. Safarik of Kosice”, Slovak Republic, 21st- 28th of May 2017.
- Universidad de Chile, Santiago de Chile, 8th - 13th of August, 1st- 16th of December 2017.
- LANCIC - Laboratorio Nacional de Ciencias para la Investigación y Conservación del Patrimonio Cultural, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico D.F., 13th- 21st of August 2017.
- The Metropolitan Museum of Art of New York, New York, USA, 30th of October - 7th of November 2017.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- Institute of Science and Technology in Art, Fine Arts Academy, Vienna, Austria, 6th- 9th of June 2017.
- The Metropolitan Museum of Art of New York, New York, USA, 30th of October - 28th of November 2017.
- Department of Chemistry, City College of New York, City University of New York, New York, USA, 29th of November - 20th of December 2017.

Enrique Nácher González.

- GANIL, Caen, France, 5th-12th of May 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 22nd-29th of May 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 16th - 26th of October 2017.

Irene Marroquín Alonso.

- Aarhus University, Aarhus, Denmark, 20-27th of March 2017 (Meeting).
- CERN, Geneva, Switzerland, 22nd-30th of May 2017 (Experiment attended).

Javier Díaz Ovejas.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 15th -30th of May 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 21th of August-30th of September 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 2nd-27th of October 2017.

Víctor Vaquero Soto.

- RIKEN, Tokyo, Japan, 4th of April- 30th of June 2017
- JYFL, Jyväskylä, Finland, 23rd-28th of August 2017.

Silvia Viñals i Onses.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 25th of April-30th of May 2017.
- ISOLDE Nuclear Astrophysics School, ISOLDE, CERN, Switzerland, 9th-11th of May 2017.
- International School of Physics “Enrico Fermi”, Course “Nuclear Physics with Stable and Radioactive Ion Beams”, Varena, Italy, 14th-19th of July 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 27th of August-4th of September 2017.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 17th-27th of October 2017.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Rafael Escribano Torres.**

- Institute of Low Temperature Science, Hokkaido University, Sapporo (Japan), 22nd of May-17th of June 2017.

Germán Molpeceres de Diego.

- Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona (Spain) 1st of April-1st of July 2017.

Germán Molpeceres de Diego.

- Institute of Low Temperature Science, Hokkaido University, Sapporo (Japan), 6th of October-17th of December 2017.

José Luis Doménech Martínez.

- Physicalische Institut, Universität zu Köln, Köln (Germany), 3rd-23rd of May 2017.

José M. Fernández Sánchez.

- Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) at Deutsche Synchrotron (DESY), Hamburg, Germany, 12th-17th of June 2017.

CAPÍTULO 5

LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES

CHAPTER 5

TEACHING, OUTREACH AND OTHER ACTIVITIES

5.1 DOCENCIA / TEACHING

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

Pedro Sarriguren Suquibide.

- Prácticas Externas Curriculares; Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. Técnicas de campo medio autoconsistente en el núcleo atómico. **26th of June 2017- 11th of September 2017, 150 hours.**

Fernando Barbero González.

- Prácticas Externas de Grado; Grado en Ingeniería de la Energía (National Official), Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid. **1st of February 2017. 126 horas del alumno.**

Eduardo Garrido Bellido.

- Few-body techniques using coordinate space for bound and continuum states; International School on Critical Stability of Quantum Few-Body Systems (International). **9th of October, 7 hours.**
- Prácticas externas de master; Máster Interuniversitario de Física Nuclear (National Official), Universidad Complutense de Madrid. **15th of April 2017. 600 horas del alumno.**

Guillermo A. Mena Marugán.

- Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **1st of February 2016- 2nd of June 2017, 150 hours.**

Luis J. Garay Elizondo.

- Electrodinámica clásica, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **26th of September 2017- 20th of January 2018, 45 hours.**
- Métodos Matemáticos I, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **26th of September 2017- 20th of January 2018, 2 groups, 60 hours.**
- Universo, Espacio y Tiempo, Universidad para los mayores (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **February 2017- May 2017, 12 hours.**
- Ciento dos años de la Teoría de la Relatividad General, Curso de formación de profesores (National Official), Centro Territorial de Innovación y Formación Madrid-Sur, Leganés, **November-December 2017, 9 hours.**

Enrique Benito-Matías.

- Matemáticas Empresariales, Grado de Publicidad y RRPP-ADE (National Official), Universidad Rey Juan Carlos, **6th of September 2017- 21st of December 2017, 60 hours.**
- Matemáticas Empresariales, Grado de ADE-Derecho (National Official), Universidad Rey Juan Carlos, **6th of September 2017- 21st of December, 60 hours.**

Juan Margalef Bentabol.

- Álgebra lineal, Grado de Ingeniería Informática (National Official), Universidad Carlos III de Madrid, **September-December 2017, 28 hours.**

Oscar Moreno Díaz.

- Energía Nuclear, Máster Universitario en Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2017-February 2017, 18 hours.**
- Energía y Medio Ambiente, Grado en Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **April 2017, 6 hours.**
- Estructura de la Materia, Grado en Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **February 2017-June 2017, 30 hours.**
- Sistemas y Reactores de Fisión, Máster Universitario en Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **February 2017-June 2017, 20 hours.**

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

Olof Tengblad.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Coordina Universidad de Sevilla. **16th-20th of January 2017, 20 hours.**

Santiago Sánchez Cortés.

- Raman Spectroscopy, Basic principles and Bioapplications--Biophotonics School- PhD - Center for Interdisciplinary Biosciences, P. J. Šafárik University in Košice, Slovakia. **23rd of May 2017, 2 hours.**
- Taller Especializado de Espectroscopías Raman y SERS aplicadas al Estudio del Patrimonio Cultural— Formación de estudiantes de postgrado en el LANCIC- PhD-National-- Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. **16th- 18th of August 2017, 20 hours.**
- Workshop on Surface-enhanced Raman Scattering and its Applications in the Cultural Heritage— Workshop for PhD Students - International- Materials Science and Engineering Department, University of California Los Angeles (UCLA), USA. **9th of November 2017, 8 hours.**
- Prácticas Externas de grado; Grado en Química (National Official), Universidad Autónoma de Madrid. **17th of February 2017. 135 y 140 horas de dos alumnos.**

José Antonio Sánchez Gil.

- Prácticas externas de Grado; Grado en Físicas (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid. **January-June 2017, 141 hours del alumno.**

M^a Vega Cañamares Arribas.

- Plasmonic sensors: SERS-Master Erasmus Mundus “Molecular nano- and biophotonics for telecommunications and biotechnologies” (Monabiphot) - International, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spain. **24th of February 2017, 2 hours.**
- Workshop on SERS for the analysis of objects of art and archaeology- Researchers - Local- Institute of Science and Technology in Art, Fine Arts Academy, Vienna, Austria. **6th-8th of June 2017, 24 hours.**
- Fundamentos y Aplicaciones de Espectroscopía IR y Raman-Master and PhD – National - Técnicas de Espectroscopía y Aplicaciones en Nanotecnología-Summer School SEA (Sociedad de Espectroscopía Aplicada), Universidad de Oviedo, Mieres, Spain. **4th of September 2017, 2 hours.**

Sagrario Martínez Ramírez.

- Curso Química del Cemento “Tomás Vázquez”- Curso Posgrado CSIC, International, CSIC-IECA, Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja”, Madrid, **7th-17th of March 2017, 5 hours.**
- Master “Ensayos y técnicas no destructivas aplicadas en la diagnosis de las construcciones históricas”, UPV, Escuela Técnica Superior de Arquitectura, Valencia. **13th of February 2017, curso académico 2016/2017, 5 hours.**
- Master Oficial en Conservación del Patrimonio Arquitectónico-“Ensayos y técnicas no destructivas aplicadas en la diagnosis de las construcciones históricas”, UPV, Escuela Técnica Superior de Arquitectura, Valencia, **30th of November 2017, curso académico 2017/2018, 5 hours.**
- Curso “Metodologías avanzadas no destructivas: análisis de Patrimonio (MetAnD)”-Curso de verano UIMP-CSIC, Madrid, **30th of May 2017, 5 hours.**
- Desarrollo Trabajo fin de grado, Grado Ciencias Ambientales (National Official), Universidad Autónoma de Madrid. **189 y 375 horas de dos alumnos.**
- Prácticas Externas de grado; Grado en Química (National Official), UNED. **1st of February 2017. 650 horas del alumno.**

Enrique Nácher González.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Coordina Universidad de Sevilla. **16th-20th of January 2017--20 hours.**
- Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Material (teoría)- European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering physics (International) – Coordina Universidad Carlos III de Madrid. **6th- 27th of March 2017, 10 hours.**

M^a Paz Sevilla Sierra.

- Física Aplicada a Farmacia (Prácticas de Laboratorio), 1º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **November 2017, 12 hours.**
- Fisicoquímica Farmacéutica (Prácticas de Laboratorio), 2º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2017, 90 hours.**
- Fisicoquímica Farmacéutica (Teoría), 2º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2017, 60 hours.**
- Resonancia magnética nuclear, ultrasonidos e imagen molecular, Máster Universitario en Física Biomédica, (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **May 2017, 6 hours.**

Irene Marroquín Alonso.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear y Estructura Nuclear 2016-2017: Master Interuniversitario en Física Nuclear (National Official). Coordina Universidad de Sevilla. **16th - 20th of January 2017, 19 hours.**
- Laboratory Project: experimental techniques in plasmas, nuclear physics and materials – Erasmus Mundus European Master in plasma physics and nuclear fusion (International official) – Universiteit Gent (Ghent; Belgium), Universidad Carlos III de Madrid. **7th - 28th of April 2017, 3 hours.**

Javier Díaz Ovejas.

- Laboratory Project: Gamma spectroscopy with germanium detector - Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials – Erasmus Mundus European Master in Plasma Physics and Nuclear Fusion (International Official) **April 2017, 8 hours.**

Víctor Vaquero Soto.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Coordina Universidad de Sevilla. **16th-20th of January 2017, 20 hours.**

Silvia Viñals i Onses.

- Técnicas experimentales en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Máster Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Coordina Universidad de Sevilla. **16th - 20th of January 2017, 20 hours.**
- Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Material (Prácticas de Laboratorio) – European Master of science in Nuclear Fusion and Engineering physics (International Official) – Universidad Carlos III de Madrid. **20th of April 2017, 4 hours.**

Moisés Martín Garrido.

- Metodologías avanzadas no destructivas: análisis de Patrimonio (MetAnD); Cursos de verano UIMP (National Official). **30th of May 2017, 1 hour.**

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Belén Maté Naya y Rafael Escribano Torres.**

- Prácticas externas de grado. Grado en Ciencias experimentales (National Official). Universidad Rey Juan Carlos. **1st of February, 288 hours del alumno.**

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Javier Martínez de Salazar Bascuñana.**

- Prácticas trabajo fin de grado; Grado en Ingeniería de Materiales. Universidad Rey Juan Carlos. 300 horas del alumno.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Experimental testing for mechanical characterization – Programa del Máster de Ingeniería de Materiales, ETSI Caminos, Canales y Puertos, (Internacional), Universidad Politécnica de Madrid, **23rd October 2017, 2 hours.**

Juan Francisco Vega Borrego.

- Asignatura de Reología - Programa del Máster de Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo, **20th-28th February 2017, 12 hours.**

Javier Ramos Díaz.

- Herramientas computacionales aplicadas al estudio de la estructura y dinámica de polímeros - Programa del Máster de Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo, **22nd February 2017, 1 hour.**
- Simulación molecular usando Materials Studio, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, **19 of September 2017, 8 hours.**

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

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

José González Carmona.

- *El grafeno como modelo de fermiones en dos dimensiones*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid (Spain), 6th of April 2017.
- *Some applications of the physics of exceptional points to topological semimetals*, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Madrid (Spain), 30th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Introduction to LQG*, Graduate days Graz (Austria), 30th of March 2017.
- *Introduction to LQG II*, Graduate days Graz (Austria), 30th of March 2017.
- *Summation of divergent series: An invention of the devil or a blessing for physics?*, Universidad de Valencia, Valencia (Spain), 5th of June 2017.
- *Summation of divergent series: An invention of the devil or a blessing for physics?*, IEM, Madrid (Spain), 7th of July 2017.
- *Summation of divergent series: An invention of the devil or a blessing for physics?*, Universiad Carlos III, Madrid (Spain), 3rd of November 2017.
- *The distribution of the eigenvalues of the area operator: some technical details*, Institute for Theoretical Physics, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg (Germany), 11th of December 2017.
- *The distribution of the eigenvalues of the area operator: A game of partitions?*, Institute for Theoretical Physics, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg (Germany), 11th of December 2017.

Eduardo Garrido Bellido.

- *Few-body techniques using coordinate space for bound and continuum states*, International School on Critical Stability of Quantum Few-Body Systems, Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden (Germany), 9th-13th of October 2017.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Effects of Hybrid Loop Quantum Cosmology in the CMB*, FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Germany), 5th of December 2017.
- *Gauge Invariant Perturbations and Covariance in Hybrid Loop Quantum Cosmology*, FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Germany), 5th of December 2017.
- *Loop Quantum Cosmology: Predictions for the CMB*, Lorentz Center, Leiden University (Holland), 13th of June 2017.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Topological protected evanescent states as exceptional points in topological*, Department of Physics, University of Oxford, Oxford (UK), 23th of March 2017.

Gianluca Calcagni.

- *Big bang, cosmological constant and quantum gravity: wonders of the Century*, IEM-CSIC, Madrid (Spain), 23rd of February 2017.
- *Big bang, cosmological constant and quantum gravity: wonders of the Century*, OIST, Okinawa (Japan), 28th of February 2017.
- *Gravedad y cosmología cuánticas*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid (Spain), 6th of April 2017.
- *Multiscale and multifractional spacetimes in quantum gravity: status report*, Fudan U., Shanghai (China), 15th of June 2017.

- *Multiscale and multifractional spacetimes in quantum gravity: status report*, SUSTech, Shenzhen (China), 23rd of June 2017.
- *Detecting quantum gravity in the sky: status of multifractional theories*, Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay, Paris (France), 10th of November 2017.

Luis J. Garay Elizondo.

- *Gravitational-wave echoes from macroscopic quantum gravity effects*, Charles University, Prague (Czech Republic), 16th of June 2017.
- *Gravitational-wave echoes from macroscopic quantum gravity effects*, IQC, Waterloo (Canada), 30th of August 2017.

Enrique Benito-Matías.

- *Applications of Random Matrix Theory to Disordered Floquet Systems* Universidad Complutense de Madrid, Madrid (Spain), 6th of April 2017.

Laura Castelló Gomar.

- *Primordial perturbations in Hybrid (Loop) Quantum Cosmology*, Ciclo “De Madrid al Cosmos”, IEM-U. Complutense, Madrid (Spain), 9th of February 2017.
- *Primordial perturbations in Hybrid Quantum Cosmology*, Perimeter Institute, Waterloo (Canada), 12th of January 2017.

Beatriz Elizaga de Navascués.

- *Unitary dynamics as a uniqueness criterion for the quantization of Dirac fields*, IST Lisboa, Lisbon (Portugal), 6th of September 2017.
- *Unitary dynamics as a uniqueness criterion for the quantization of Dirac fields*, FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Germany), 26th of July 2017.

Juan Margalef Bentabol.

- *Geometry, constraints and boundaries. It takes three to tango*, Institute for Theoretical Physics, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg (Germany), 5th of April 2017.
- *About non standard boundary conditions*. Institute for Theoretical Physics, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg (Germany), 21st of June 2017.

Daniel Martín de Blas.

- *Primordial power spectra in loop quantum cosmology*, Univerzita Karlova, Prague (Czech Republic), 29th of June 2017.
- Mini-course: *Numerical methods for cosmological perturbations in LQC*, IEM-flation, Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid (Spain), 3rd-5th of May 2017.
- *The role of the vacuum for cosmological perturbations (in loop quantum cosmology)*, “Gravitículas” seminar series, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago (Chile), 31st of August 2017

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

Olof Tengblad.

- *Física Nuclear (1): Anatomía de un experimento*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 4th-6th of April 2017.

Carlos Cabrillo García.

- *La física de la materia desordenada*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 4th-6th of April 2017.

Santiago Sánchez Cortés.

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 5th of April 2017.
- *Espectroscopías Ópticas en el estudio del Patrimonio Histórico*. I Taller de Arqueometría: “Diálogo entre Arqueología y Química al servicio del Patrimonio y la Comunidad” Universidad de Tarapacá, Arica, Chile, 7th of August 2017.
- *Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS): Strategies for Highly Sensitive Molecular Detection and Bioanalysis*, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico D.F., 15th of August 2017.
- *Plasmonic-based spectroscopy (SERS and SEF): Nanofabrication, functionalization and molecular detection*, Materials Science and Engineering Department, University of California Los Angeles (UCLA), USA, 8th of November 2017.

José Antonio Sánchez Gil.

- *Nanofotónica y metamateriales con nanoestructuras metálicas y semiconductoras*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 4th-6th of April 2017.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- Codirection of the *XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 4th-6th of April 2017.
- *SERS for the analysis of objects of art and archaeology*, ChemArt (Chemistry in Art and Cultural Heritage) Series, Summer Session, Institute of Science and Technology in Art, Fine Arts Academy, Vienna, Austria. 8th of June 2017.
- “*On the fiber*” *SERS Detection of Synthetic Dyes Employing Laser Photoreduced Ag Nanoparticles*, Department of Chemistry, City College, City University of New York, New York, USA, 14th of November 2017.

Sagrario Martínez Ramírez.

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio Histórico-Artístico*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 5th of April 2017.
- *Metodologías avanzadas no destructivas (MetAnd): Analisis de Patrimonio* (dirección del curso), Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 30th-31st of May 2017.
- *Aplicación de la espectroscopía Raman al estudio de las fases anhidras e hidratadas de sistemas cementantes*, conference of the Workshop: “Understanding Materials Structure and Performance by Raman Confocal Microscopy”, Instituto de Cerámica y Vidrio, Cantoblanco, Madrid, 26th-28th of April 2017.

Enrique Nácher González.

- *Física Nuclear (2): aplicaciones en física médica y astrofísica*, (talk and visits to laboratories), part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 4th-6th of April 2017.

Javier Díaz Ovejás.

- *Experimental studies of exotic nuclear structure (poster)*. PhDays. Universidad Complutense de Madrid. December 2017.
- *Estudios experimentales de la estructura nuclear exótica (contribución oral)*. Jornadas de Doctorandos 2017/2018. Universidad Complutense de Madrid, 19th of December 2017.

Silvia Viñal i Onses.

- *Electron Capture of ⁸B into highly excited states in ⁸Be (poster)* – PhDays UCM – Universidad Complutense de Madrid, 14th-15th of December 2017.
- *Captura electrónica del núcleo ⁸B a los estados excitados del ⁸Be (oral contribution)* – Jornadas de doctorandos de la UCM – Universidad Complutense de Madrid, 19th of December 2017.
- *Electron Capture of ⁸B into highly excited states in ⁸Be (oral contribution as a finalist)* – PhDays UCM – Universidad Complutense de Madrid.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José Luis Doménech Martínez.

- *Astrofísica de laboratorio: Espectroscopia de iones moleculares*: Part of “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.
- *Visit to the Laboratorio de espectroscopía infrarroja de alta resolución*. Part of “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Plasmas a baja temperatura*, part of the “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.
- *Guided visit to the Laboratorio de Plasmas Fríos*, part of the “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.

Belén Maté Naya.

- *Hielos astrofísicos*, part of the “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017

Juan Ortigoso Martínez.

- Nonadiabatic behavior in molecular quantum dynamics, Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburgo, Alemania, 26-1-2017.

José M. Fernández Sánchez.

- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*, conferencia a alumnos del itinerario Científico-Tecnológico, IES Ventura Rodríguez, Boadilla del Monte, Madrid, Spain, 27th of March 2017.
- *Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio*, part of the “XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics*. Part of “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.

Guzmán Tejeda Gala.

- *Codirector del “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th - 6th of April 2017.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics*. Part of “XIV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 4th of April 2017.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz.

- *Aplicaciones de la Espectroscopía Dieléctrica en Física de Polímeros*. Master de Ciencia y Tecnología de Polímeros, 17th of January 2017. ICTP-CSIC Madrid, Spain.

Aurora Nogales Ruiz.

- *Micro and nanostructuring functional polymers Physical implications and potential applications*, Instituto de Materiales Poliméricos' POLYMAT, de la Universidad del País Vasco, San Sebastian, 29th of June 2017.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *El uso de Grandes Instalaciones Científicas en la investigación de la Materia Condensada Blanda*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 4th-6th of April 2017.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Simulación y experimentos en Física Macromolecular*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 4th-6th of April 2017.

Edgar Gutiérrez Fernández.

- *Nanopartículas poliméricas y sus aplicaciones*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 4th-6th of April 2017.

Patricia Enrique-Jiménez.

- *Propiedades nanomecánicas en polímeros*, XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 4th-6th of April 2017.

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

- Review Editor in Cosmology of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences in Physics*.

Maria Luisa Senent Diez.

- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1401 “Our Astrochemical History”.
- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1405 “MOLIM”.

Gianluca Calcagni.

- Associate Editor of *Frontiers in Physics* and *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*.
- Organizer of the cycle of theoretical-physics seminars “De Madrid al Cosmos”, taking place every other week alternatively at the IEM-CSIC and the Complutense University in Madrid.
- Reviewer of research proposals for the National Science Centre (Narodowe Centrum Nauki, NCN), Poland.
- Reviewer of research proposals for the National Commission for Scientific and Technological Research (CONICYT), Chile.
- Honorable Mention in the 2017 Essays on Gravitation of the Gravity Research Foundation (see ISI publications).

5.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY**Francisco Javier Bermejo Barrera.**

- Member of the Editorial Board of *the Physical Review Letters* (Divisional Associate Editor in Condensed Matter Physics).
- Member of of Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FAP5) of the *ISIS Pulsed Neutron & Muon Source*.

Olof Tengblad.

- Spanish delegate of the Collaboration Meeting at 79th ISOLDE Collaboration Committee Meeting (ISCC meeting), CERN (Switzerland), 27th of June 2017.
- Meeting organizer and Conclusion remarks at 1st Annual Meeting, PASPAG (Collaboration Meeting), Paris (France), 25th of April 2017.
- Member of the Project Coordination Committee of ENSAR2 at PCC Meeting (Collaboration Meeting), Caen 9th of May 2017.

José Antonio Sánchez Gil.

- Senior Member of the *Optical Society of America* (since June).
- Member of the Scientific Committee of *OPTOEL17*, Santiago de Compostela (Spain).

Ricardo Fernández Perea.

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

Enrique Nacher González.

- Coordinator and Organizer of the Working Group “High-efficiency and fast-timing scintillators” of the *Second Workshop of the Nuclear Spectroscopy Instrumentation Network of ENSAR2, NUSPIN 2017*, GSI, Darmstadt, Germany, 26th-29th of June 2017.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Dionisio Bermejo Plaza.**

- 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*.

Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

- 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 Advisory Committee of the *14th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015 Barcelona Spain 2017)*.

Isabel Tanarro Onrubia.

- President of the board of the “Grupo Especializado de Física de Plasmas” of the Real Sociedad Española de Física (Spain) since June 2016.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG). Period 2012-2018.

Belén Maté Naya.

- Secretary of the *Sociedad Española de Óptica- SEDOPTICA* (Spain) since 2017.

Vicente Timón Salinero.

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

Salvador Montero Martín.

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

José M. Fernández Sánchez.

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

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Tiberio A. Ezquerro Sanz.**

- Member of the Proposal Review Panel: Soft Condensed Matter: Surfaces and Interfaces of the German Synchrotron PETRA III at DESY, Hamburg, Germany.
- Member of the Evaluation Panel: Life science & soft condensed matter of the Spanish synchrotron ALBA, Cerdanyola del Vallés, Barcelona, Spain.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the POLYCHAR Scientific Committee.
- Member of the Committees for the following POLYCHAR Prizes (2017):
 - The Paul J. Flory Polymer Research Prize
 - The International POLYCHAR Materials Research Prize
 - The Bruce Hartmann Prize for Young Scientist
 - The Jürgen Springer Prize for Young Scientist
 - The Carl Klason Student Awards
 - The IUPAC Prizes for best student posters

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.
- President of the Executive Board of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE), since September 2013 until October 2017 (<http://www.ual.es/Congresos/AUSE/>).
- CSIC representative of the SpLine-BM25 Scientific Committee at the European Synchrotron Radiation Facility since June 2015.
- Member of the Facility Access Panel for the SpLine-BM25 beamline at the European Synchrotron Radiation Facility since October 2015.
- Member of Editorial Board of the journal "ISRN Nanomaterials" since March 2012.
- Senior Editor of the "Journal of Nanoscience Letters" since June 2014.

Juan Francisco Vega Borrego.

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

Edgar Gutiérrez Fernández.

- AUSE prize to the best poster, secondary award 'accésit' in the VIII AUSE Congress and III ALBA User's MEETING, Madrid, Spain, 9th - 11th October 2017

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

El grafeno y sus parientes (nanotubos y fullerenos).
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia. Semana de la Ciencia.
Madrid.
10th of November 2017.

José González Carmona

¿Qué es el grafeno?
Vídeo divulgativo.
<http://neurasciencia.com/que-es-el-grafeno/>
https://www.youtube.com/watch?time_continue=1&v=g7qtU0dmJqY
Portal de divulgación "Neuras Ciencia".
19th of April 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.
Charla divulgativa.
I.E.S. Juana de Castilla.
Madrid.
19th of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.
Charla divulgativa.
I.E.S. Las Musas
Madrid.
20th of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

¿Qué es la relatividad?
Charla divulgativa.
Colegio N. S. Infantes
Toledo.
25th of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

¿Qué es la relatividad?

Charla divulgativa.

I.E.S. Julio Caro Baroja (Fuenlabrada).

Madrid.

27th of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.

Charla divulgativa.

I.E.S. Juana de Pimentel.

Arenas de San Pedro (Ávila).

31st of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

La física de las interacciones fundamentales.

Charla divulgativa.

Universidad Popular Carmen de Michelena, (Tres Cantos).

Madrid.

31st of January 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.

Charla divulgativa.

I.E.S. Los Olivos.

Mejorada del Campo (Madrid).

6th of February 2017.

Jesús Fernando Barbero González

¿Qué es la relatividad?

Charla divulgativa.

I.E.S. Margarita Salas, (Majadahonda).

Madrid.

4th of April 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales Asombrosos.

Charla divulgativa.

I.E.S. Margarita Salas, (Majadahonda).

Madrid.

4th of April 2017.

Jesús Fernando Barbero González

La física de las interacciones fundamentales.

Charla divulgativa.

I.E.S. Carmen Martín Gaité (Moralzarzal).

Madrid.

15th of May 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.

Charla divulgativa.

I.E.S. Las Musas.

Madrid.

26th of October 2017.

Jesús Fernando Barbero González

¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar).

Charla divulgativa.

I.E.S. Las Musas.

Madrid.

26th of October 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.
Charla divulgativa.
I.E.S. Las Rozas I (Las Rozas).
Madrid.
15th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Explorando el Sistema Solar.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Semana de la Ciencia.
Madrid.
15th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González

La física de las interacciones fundamentales.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Semana de la Ciencia.
Madrid.
15th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.
Charla divulgativa.
I.E.S. Sapere Aude (Villanueva del Pardillo).
Madrid.
27th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González

La física de las interacciones fundamentales.
Charla divulgativa.
I.E.S. Sapere Aude (Villanueva del Pardillo).
Madrid.
27th of November 2017.

Jesús Fernando Barbero González

Materiales asombrosos.
Charla divulgativa.
I.E.S. Juan de Herrera.
San Lorenzo del Escorial (Madrid).
30th of November 2017.

Guillermo A. Mena Marugán

El fondo de radiación cósmica y el Universo cuántico.
Charla divulgativa.
Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Minas, UPM.
Madrid.
19th of December 2017.

Rafael A. Molina Fernández

Nuevas tecnologías cuánticas: Realidades y promesas.
Charla divulgativa.
Aula de Humanidades, Ayuntamiento de Guadarrama.
Guadarrama.
16th of May 2017.

Rafael A. Molina Fernández

Tecnologías cuánticas: Promesas y realidades.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia. Semana de la Ciencia.
Madrid.
7th of November 2017.

Rafael A. Molina Fernández

Fotosíntesis: El punto de vista físico.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia. Semana de la Ciencia.
Madrid.
13th of November 2017.

Gianluca Calcagni

La Tierra es plana: Gravedad cuántica para todos.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia. Semana de la Ciencia.
Madrid.
6th of November 2017.

Luis J. Garay Elizondo

El tiempo en pedazos.
Charla divulgativa.
Asociación Astronómica Madrileña.
Madrid.
28th of February 2017.

Luis J. Garay Elizondo

El tiempo en pedazos.
Charla divulgativa.
CMU Teresa de Jesús.
Madrid.
18th of April 2017.

Enrique Benito-Matías

Energía y Movimiento perpetuo.
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia. Semana de la Ciencia.
Madrid.
13th of November 2017.

Juan Margalef Bentabol

Contando con clips llegamos a... ¡los grafos!
Charla divulgativa.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Semana de la Ciencia.
Madrid.
8th of November 2017.

Juan Margalef Bentabol

Contando con clips llegamos a... ¡los grafos!
Charla divulgativa.
Universidad Carlos III de Madrid, Semana de la Ciencia.
Madrid.
14th of November 2017.

Juan Margalef Bentabol

Clips y números naturales.
Aparición en televisión.
Programa La aventura del saber (La 2).
6th of March 2017.

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

Santiago Sánchez Cortés

Participación en Programa de Radio *Quiero Ser Científico*.
Radio de la Universidad de Chile.
Santiago de Chile
4th of December 2017.

Sagrario Martínez Ramírez

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”.
XIV Semana de la Ciencia-CSIC-CAM.
CEIP Real Arma, Madrid.
8th of November 2017.

Charla “de la Cal al cemento”.
XIV Semana de la Ciencia-CSIC-CAM.
Colegio Chamberí, Madrid.
17th of November 2017.

Taller “de la Cal al cemento”.
Taller en los colegios.
Hospital La Paz, Madrid.
1st of February 2017.

Programa Educativo 4º ESO+Empresa.
Colaboracion con centros educativos.
Comunidad de Madrid, IEM-CSIC.
2nd- 4th April 2017.

Taller “La Química del yeso”.
IES Ramiro de Maeztu, Madrid.
15th of December 2017.

Enrique Nácher González

Programa visitas guiadas
IFIC-Observatorio Astronómico de la Universidad de Valencia.
Colegio Pureza de Maria, Valencia.
11th of January 2017.

Diego Romero Abujetas

Actor en la obra de teatro: *Ciencia a la cuarta (pared)*
Grupo TeatrIEM (grupo de teatro del Instituto de Estructura de la Materia).
Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.
Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid (Spain), 16th-18th of November 2017.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Vicente Timón Salinero

Taller “La ciencia y mis experimentos caseros”
Actividad dirigida a estudiantes de 5º y 6º de primaria.
Semana de la Ciencia - Comunidad de Madrid
6th-19th of November 2017.

José M. Fernández Sánchez

Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo
Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid
15th of November 2017.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz

Actor in “Tu nombre me sabe a... Ciencia”.

Scientific theater - TeatrIEM

- 10th of February 2017. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

- 19th of February 2017. Residencia de Estudiantes, Madrid.

- 14th of July 2017. Fundación Olivar de Castillejo, Madrid

Actor in “[Ciencia]⁴ pared”.

Scientific theater - TeatrIEM

- 16th-18th of November 2017 Semana de la Ciencia –Museo Nac. Ciencias Naturales, CSIC, Madrid.

Araceli Flores Aguilar-Amat

Artículo de divulgación.

Indentation in Polymers.

Journal of Materials Education **39**, p.173 (2017).

Participación en el programa 4ºESO+EMPRESA, abril 2017.

Mari Cruz García Gutiérrez

Actress in “Tu nombre me sabe a... Ciencia”.

Scientific theater - TeatrIEM

- 10th of February 2017. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

- 19th of February 2017. Residencia de Estudiantes, Madrid.

- 14th of July 2017. Fundación Olivar de Castillejo, Madrid

Actress in “[Ciencia]⁴ pared” and author of “Inquietudes en un mundo hostil”

Scientific theater - TeatrIEM

- 16-18th of November 2017 Semana de la Ciencia - Museo Nac. Ciencias Naturales, CSIC, Madrid

Juan Francisco Vega Borrego

Participación en el programa 4ºESO+EMPRESA, abril 2017.

Patricia Enrique Jiménez

Participación en el programa 4ºESO+EMPRESA, abril 2017.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

Reuniones de transferencia de tecnología

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Bratislava, Slovak Republic.

Date: 18th – 20th June, 2017.

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Videoconference

Date: Every Monday at 13.00 from September to December 2017.

Miembros de Comités Científicos Asesores.

Member: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Regulaxis SAS Company.**

Place: Technological Park in Paris (France).

Date: 2017

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:

Jesús Fernando Barbero González.

- *Group of Teorías de Campos y Física Estadística, Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany, University of Carlos III de Madrid.*
Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

María Luisa Senent Díez.

- *Research group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN), University of Huelva.*
Responsible: Miguel Carvajal Zaera.

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

Santiago Sánchez Cortés.

- *Group of Spectroscopy and Molecular Structure (Departament of Physical Chemistry), University of Málaga.*
Responsible: Juan Carlos Otero.

Otras actividades / Other activities:

Sagrario Martínez Ramírez.

- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN05/CTN-80. Cales.
- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80. Cementos y cales.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

- *Molecular Physical Chemistry, comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I, Universidad Complutense de Madrid.*
Responsible: F. Javier Aoiz

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

María José Capitán Aranda.

- *Física de Sistemas Crecidos con Baja Dimensionalidad, Universidad Autónoma de Madrid.*
Responsible: Jesús Álvarez Alonso

Otras actividades / Other activities:**Aurora Nogales Ruiz.**

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 15th-18th of February 2017.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (beamline NCD). Barcelona, Spain, 23rd-24th of November 2017.
- Participation in the Institut Laue Langevin Subcommittee Meeting, Grenoble, France, 4th-5th April, 2017.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 2nd-7th of July 2017.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 15th-18th of February 2017
- Measurements in Petra Synchrotron, (PO3 beamline). Hamburg, Germany, 18th-19th of April 2017.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 2nd-7th of July 2017.

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 and M.L. Senent.
Theoretical characterization of the C_6N chain from highly correlated ab initio methods.
Astrophysical Journal **842**, 107-814 (2017).
2. G. Amelino-Camelia, G. Calcagni, M. Ronco.
Imprint of quantum gravity in the dimension and fabric of spacetime.
Physics Letters B **774**, 630 (2017).
3. A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra.
Temperature dependence of the symmetry energy and neutron skins in Ni, Sn, and Pb isotopic chains
Physical Review C **95**, 024314 (2017).
4. M. Arzano, G. Calcagni.
Finite entanglement entropy and spectral dimension in quantum gravity.
European Physical Journal C **77**, 835 (2017).
5. M. Arzano, G. Calcagni.
Entanglement entropy, scale-dependent dimensions and the origin of gravity.
International Journal of Modern Physics D **26**, 1743030 (2017). Recibió Mención Honorable en los 2017 Essays on Gravitation de la Gravity Research Foundation.
6. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, Eduardo J. S. Villaseñor.
Functional evolution of scalar fields in bounded one-dimensional regions.
Classical and Quantum Gravity **34**, 065004 (2017).
7. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, Eduardo J. S. Villaseñor.
Boundary Hilbert spaces and trace operators.
Classical and Quantum Gravity **34**, 095005 (2017).
8. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Weyl relativity: A novel approach to Weyl's ideas.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1706**, 014 (2017).
9. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Gravitational wave echoes from macroscopic quantum gravity effects.
Journal of High Energy Physics **1705**, 054 (2017).
10. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Exponential fading to white of black holes in quantum gravity.
Classical Quantum Gravity **34**, 105007 (2017).
11. E. Benito-Matías, R.A. Molina.
Localization length versus level repulsion in one-dimensional driven disordered quantum wires.
Physical Review B **96**, 174202 (2017).
12. A. Bouallagui, A. Zanchet, O. Yazidi, N. Jaïdaneb, L. Bañares, M.L. Senent, and A. García-Vela.
Photodissociation of the CH_3O and CH_3S radical molecules: An ab initio study.
Physical Chemistry Chemical Physics **19**, 31245 (2017).
13. G. Calcagni.
Lorentz violations in multifractal spacetimes.
European Physical Journal C **77**, 291 (2017).
14. G. Calcagni, M. Ronco.
Deformed symmetries in noncommutative and multifractional spacetimes.
Physical Review D **95**, 045001 (2017).

15. G. Calcagni.
Multiscale spacetimes from first principles.
Physical Review D **95**, 064057 (2017).
16. G. Calcagni.
Multifractional theories: an unconventional review.
Journal of High Energy Physics **1703**, 138 (2017).
17. G. Calcagni, M. Ronco, D. Rodríguez Fernández.
Black holes in multifractional and Lorentz-violating models.
European Physical Journal C **77**, 335 (2017).
18. G. Calcagni.
Complex dimensions and their observability.
Physical Review D **96**, 046001 (2017).
19. G. Calcagni, M. Ronco.
Dimensional flow and fuzziness in quantum gravity: emergence of stochastic spacetime.
Nuclear Physics B **923**, 144 (2017).
20. G. Calcagni, L. Modesto.
Stability of Schwarzschild singularity in non-local gravity.
Physics Letters B **773**, 596 (2017).
21. L. Castelló Gomar, D. Martín-de Blas, G.A. Mena Marugán, and J. Olmedo.
Hybrid Loop Quantum Cosmology and predictions for the cosmic microwave background.
Physical Review D **96**, 103528 (2017).
22. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, J. Olmedo, and J.M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock quantization of scalar fields in a Bianchi I cosmology with unitary dynamics.
Physical Review D **94**, 105019 (2017).
23. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
Dirac Fields in flat FLRW cosmology: Uniqueness of the Fock quantization.
Annals of Physics **376**, 76 (2017).
24. S. Dalbouha, R. Boussessi, N. Komiha and M.L. Senent.
Stability of Van der Waals Complexes of the Greenhouse Effect Gases NH_3 , SO_2 and CO with Imidazole in Gas Mixtures Containing CO_2 .
Computational and Theoretical Chemistry, **1099**, 8 (2017).
25. S. Dalbouha, R. Domínguez-Gómez and M. L. Senent.
Structural and spectroscopic characterization of various isotopologues of 2-Hydroxyacetonitrile using highly correlated ab initio methods.
European Physical Journal D **71**, 161 (2017).
26. B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.
Fermions in Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **96**, 044023 (2017).
27. E. Garrido, A. Kievsky, and M. Viviani.
Three-Body Wave Functions in the Continuum: Application to the Repulsive Coulomb Case.
Few-Body Systems **58**, 51 (2017).
28. J. González, and R.A. Molina.
Topological protection from exceptional points in Weyl and nodal-line semimetals.
Physical Review B **96**, 045437 (2017).
29. J. González.
Competition between disorder and interaction effects in 3D Weyl semimetals.
Physical Review B **96**, 081104(R) (2017).

30. M. R. Hermes, J. Dukelsky, and G. E. Scuseria.
Combining symmetry collective states with coupled-cluster theory: Lessons from the Agassi model Hamiltonian.
Physical Review C **95**, 064306 (2017).
31. D. Hove, E. Garrido, A.S. Jensen, H.O.U. Fynbo, D.V. Fedorov, and N. T. Zinner.
Structure and Decay at Rapid Proton Capture Waiting Points.
Few-Body Systems **58**, 13 (2017).
32. D. Hove, E. Garrido, A.S. Jensen, H.O.U. Fynbo, N. T. Zinner, and D.V. Fedorov.
Capture reactions into borromean two-proton systems at rp-waiting points.
Journal of Physics: Conference Series **863**, 012074 (2017).
33. D. Hove, E. Garrido, A. S. Jensen, P. Sarriguren, H. O. U. Fynbo, D. V. Fedorov, N. T. Zinner.
Combining Few-Body Cluster Structures with Many-Body Mean-Field Methods.
Few-Body Systems **58**, 33 (2017).
34. D. Hove, E. Garrido, P. Sarriguren, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, A. S. Jensen, and N. T. Zinner.
Combined mean-field and three-body model tested on the ^{26}O nucleus.
Physical Review C **95**, 061301 (R) (2017).
35. R.A. Jalabert, R.A. Molina, G. Weick, and D. Weinmann.
Correlation between peak-height modulation and phase lapses in transport through quantum dots.
Physical Review E **96**, 062208 (2017).
36. C. Kreisbeck, T. Kramer, and R.A. Molina.
Time-dependent wave packet simulations of transport through Aharonov-Bohm rings with an embedded quantum dot.
Journal of Physics: Condensed Matter **29**, 155301 (2017).
37. L. Margulès, B. A. McGuire, M.L. Senent, R. A. Motiyenko, A. Remijan, and J.C. Guillemin.
Submillimeter wave spectra of 2-hydroxyacetonitrile (Glycolonitrile) HOCH_2CN and its searches in SgrB2.
Astronomy & Astrophysics **601**, A50 (2017).
38. D. Martín de Blas, J. Olmedo, and T. Pawłowski.
Loop quantization of the Gowdy model with local rotational symmetry.
Physical Review D **96**, 106016 (2017).
39. A. Mercenne, N. Michel, J. Dukelsky, and M. Płoszajczak.
Solution of a pairing problem in the continuum.
Physical Review C **95**, 024324 (2017).
40. L. Muñoz, R.A. Molina, J.M.G. Gómez, and A. Heusler.
Examination of experimental evidence of chaos in bound states of ^{208}Pb .
Physical Review C **95**, 014317 (2017).
41. J. Nuño, G. Rizelli, F. Gallazzi, F. Prieto, C. Pulido, P. Corredra, S. Wabnitz, and J.D. Ania-Castañón.
Open-cavity spun fiber Raman lasers with dual polarization output.
Scientific Reports **7**, 13681 (2017).
42. S. Rice *et al.* (P. Sarriguren).
Total absorption spectroscopy study of the β decay of ^{86}Br and ^{91}Rb .
Physical Review C **96**, 014320 (2017).
43. P. Sarriguren.
Beta-decay properties of neutron-rich rare-earth isotopes.
Physical Review C **95**, 014304 (2017).
44. P. Sarriguren.
QRPA calculations of stellar weak-decay rates.
Acta Physica Polonica B **48**, 287 (2017).

45. A.D. Somoza, Kei-Wei Sun, R.A. Molina, Yang Zhao.
Dynamics of coherence, localization and excitation transfer in disordered nanorings.
Physical Chemistry Chemical Physics **19**, 25996 (2017).
46. J. M. Wahlen-Strothman, T. M. Henderson, M. R. Hermes, M. Degroote, Y. Qiu, J. Zhao, J. Dukelsky, and G. E. Scuseria.
Merging symmetry projection methods with coupled cluster theory: Lessons from the Lipkin model Hamiltonian.
Journal of Chemical Physics **146**, 054110 (2017).

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

47. D.R. Abujetas, M. A. G. Mandujano, E. R. Mendez, and J. A. Sánchez-Gil.
High-Contrast Fano Resonances in Single Semiconductor Nanorods.
ACS Photonics **4** (7), 1814-1821 (2017).
48. A. Aguilar, F. Sordo, T. Mora, L. Mena, M. Mancisidor, J. Aguilar, G. Bakedano, I. Herranz, P. Luna, M. Magan, R. Vivanco, F. Jimenez-Villacorta, K. Sjogreen, U. Oden, J. M. Perlado, J. L. Martinez, and F. J. Bermejo.
Design specification for the European Spallation Source neutron generating target element.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **856**, 99-108 (2017).
49. E. Baquedano, M. U. Gonazález, R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, and P. A. Postigo.
Low-cost and large-size nanoplasmonic sensor based on Fano resonances with fast response and high sensitivity.
Optics Express **25** (14), 15967-15976 (2017).
50. R. Boffy, J. Beaucour, and F. J. Bermejo.
A Versatile Device for Thermal Neutron Irradiation of Materials at Grazing Incidence Angles.
Nuclear Technology **200** (1), 54-65 (2017).
51. I. Bonacini, F. Gallazzi, A. Espina, M. V. Cañamares, S. Prati, R. Mazzeo and S. Sánchez-Cortés.
Sensitive "on the fiber" detection of synthetic organic dyes by laser photoinduced plasmonic Ag nanoparticles.
Journal of Raman Spectroscopy **48** (7), 925-934 (2017).
52. M.J. G. Borge and B. Jonson.
ISOLDE past, present and future.
Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **44** (4), 044011 (2017).
[Corrigendum: ISOLDE-past, present and future (Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics (2017) 44 (044011)]
53. F. Browne, A.M. Bruce, T. Sumikama, Nishizuka, ..., J. Taprogge, *et al.*
K selection in the decay of the (ν 52 [532]- 32 [411]) 4^- isomeric state in Zr 102.
Physical Review C **96** (2), 024309 (2017).
54. P.M. Carmona-Quiroga, R.M.J. Jacobs, S. Martínez-Ramírez, and H. A. Viles.
Durability of anti-graffiti coatings on stone: natural vs accelerated weathering.
Plos One **12** (2), 0172347 (2017).
55. S. Chen, P. Doornenbal, A. Obertelli, T. R. Rodríguez, G. Authalet, H. Baba, D. Calvet, F. Chateau, A. Corsi, A. Delbart, J. -M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, V. Lapoux, T. Motobayashi, M. Niikura, N. Paul, J. -Y. Rousse, H. Sakurai, C. Santamaria, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Uesaka, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. M. Bruce, R. Carroll, L. X. Chung, M. L. Cortes, M. Dewald, B. Ding, F. Flavigny, S. Franchoo, M. Gorska, A. Gottardo, A. Jungclaus, J. Lee et al.
Low-lying structure and shape evolution in neutron-rich Se isotopes.
Physical Review C **95** (4), 041302 (2017).

56. P.J. Davies, H. Grawe, K. Moschner, A. Blazhev, R. Wadsworth, P. Boutachkov, F. Ameil, A. Yagi, H. Baba, T. Bäck, M. Dewald, P. Doornenbal, T. Faestermann, A. Gengelbach..., J. Taprogge *et al.*
The role of core excitations in the structure and decay of the 16+ spin-gap isomer in 96Cd.
Physics Letters, Section B **767**, 474 (2017).
57. J. M. De la Rosa, P.M. Martín-Sánchez, S. Sánchez-Cortés, B. Hermosin, H. Knicker, and C. Saiz-Jiménez.
Structure of melanins from the fungi Ochroconis lascauxensis and Ochroconis anomala contaminating rock art in the Lascaux Cave.
Scientific Reports **7**, 13441 (2017).
58. R.V. de La Villa, R. García, S. Martínez-Ramírez, and M. Frías.
Effects of calcination temperature and the addition of ZnO on coal waste activation: A mineralogical and morphological evolution.
Applied Clay Science **150**, 1–9 (2017).
59. A. Di Pietro, J. P. Fernández-García, M. Fisichella, M. Alcorta, M. J. G. Borge, T. Davinson, F. Ferrera, P. Figuera, A. M. Laird, M. Lattuada, A. C. Shotter, N. Soic, O. Tengblad, D. Torresi, and M. Zadro.
Investigation of Cluster States in B-13 using the Li-9-alpha Resonant Elastic Scattering.
Acta Physica Polonica B **48** (3), 455-460 (2017).
60. J. M. Fitzgerald, S. Azadi, and V. Giannini.
Quantum plasmonic nanoantennas.
Physical Review B **95**, 235414 (2017).
61. F. Flavigny, P. Doornenbal, A. Obertelli, J. -P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, T. R. Rodríguez, G. Authelet, H. Baba, D. Calvet, F. Chateau, S. Chen, A. Corsi, A. Delbart, J. -M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, V. Lapoux, T. Motobayashi, M. Niikura, N. Paul, J. Y. Rousse, H. Sakurai, C. Santamaria, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Uesaka, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. Bruce, R. Carroll, L. X. Chung, M. L. Cortes, M. Dewald, B. Ding, S. Franchoo, M. Gorska, A. Gottardo, A. Jungclaus, J. Lee, M. Lettmann, B. D. Linh, J. Liu *et al.*
Shape Evolution in Neutron-Rich Krypton Isotopes Beyond N=60: First Spectroscopy of Kr-98, Kr-100.
Physical Review Letters **118** (24), 242501 (2017).
62. Y. Fuentes-Edfuf, M. García-Lechuga, D. Puerto, C. Florian, A. García-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solis and J. Siegel.
Coherent scatter-controlled phase-change grating structures in silicon using femtosecond laser pulses.
Scientific reports **7**(1), 4594 (2017).
63. Y. Fuentes-Edfuf, M. García-Lechuga, D. Puerto, C. Florian, A. García-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solis, and J. Siegel.
Fabrication of amorphous micro-ring arrays in crystalline silicon using ultrashort laser pulses.
Applied Physics Letters **110**(21), 211602 (2017).
64. H. Fynbo, O. S. Kirseboom, S. Oliver and O. Tengblad.
ISOLDE decay station for decay studies of interest in astrophysics and exotic nuclei.
Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **44** (4), 044005 (2017).
65. A. García-Leis, I. Rivera-Arreba, and S. Sánchez-Cortés.
Morphological tuning of plasmonic silver nanostars by controlling the nanoparticle growth mechanism: Application in the SERS detection of the amyloid marker Congo Red.
Colloids and Surfaces a-Physicochemical and Engineering Aspects **535**, 49-60 (2017).
66. J. F. Gebbia, M. A. Ramos, D. Szweczyk, A. Jezowski, A. I. Krivchikov, Y. V. Horbatenko, T. Guidi, F. J. Bermejo and J. L. Tamarit.
Glassy Anomalies in the Low-Temperature Thermal Properties of a Minimally Disordered Crystalline Solid.
Physical Review Letters **119** (21), 215506 (2017).
67. P. Gisbert-Quilis, M. Masetti, J. Morla-Folch, J. M. Fitzgerald, N. Pazos-Pérez, E. García-Rico, V. Giannini, R. A. Álvarez-Puebla, and L. Guerrini.
The structure of short and genomic dna at the interparticle junctions of cationic nanoparticles.
Advanced Materials Interfaces **4** :17 (2017).

68. V. Guadilla, A. Algora, J. L. Tain, J. Agramunt, J. Aysto, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, M. L. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martínez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nacher, S. E. A. Orrigo, H. Penttilä, I. Pohjalainen et al.
Characterization of a cylindrical plastic beta-detector with Monte Carlo simulations of optical photons.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **854**, 134-138 (2017).
69. V. Guadilla, A. Algora, J. L. Tain, J. Agramunt, J. Aysto, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L. M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martinez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nacher, S. E. A. Orrigo, H. Penttilä, I. Pohjalainen et al.
Study of the beta Decay of fission Products with the DTas Detector.
Acta Physica Polonica B **48** (3), 529-532 (2017).
70. V. Guadilla, A. Algora, J. L. Tain, J. Agramunt, J. Aysto, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L. M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martinez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nacher, S. E. A. Orrigo, H. Penttilä, I. Pohjalainen et al.
TAGS measurements of ^{100}Nb ground and isomeric states and ^{140}Cs for neutrino physics with the new DTAS detector.
EPJ Web of Conferences **146**, 10010 (2017).
71. V. Guadilla, A. Algora, J. L. Tain, J. Agramunt, D. Jordan, A. Montaner-Piza, S. E. A. Orrigo, B. Rubio, E. Valencia, J. Suhonen, O. Civitarese, J. Aysto, J. A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L. M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martinez, M. Monserrate, I. Moore, E. Nacher, H. Penttilä, I. Pohjalainen, A. Porta, J. Reinikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila et al.
Experimental study of Tc-100 beta decay with total absorption gamma-ray spectroscopy.
Physical Review C **96** (1), 014319 (2017).
72. M. Heine, S. Typel, M.-R. Wu, T. Adachi, Y. Aksyutina, J. Alcantara, S. Altstadt, H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, L. Atar, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Barr, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, K. Boretzky, M. J. G. Borge, G. Burgunder, M. Caamano, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall et al.
Determination of the neutron-capture rate of C-17 for r-process nucleosynthesis.
Physical Review C **95** (1), 014613 (2017).
73. A.M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, T. Pintado, P. Carmona, and F. Jiménez-Colmenero.
Infrared spectroscopy used to determine effects of chia and olive oil incorporation strategies on lipid structure of reduced-fat frankfurters.
Food Chemistry **221**, 1333 (2017).
74. J. Johansen, G. Jacob, V. Bildstein, M. J. G. Borge, M. Cubero, J. Diriken, J. Elseviers, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, L. P. Gaffney, R. Gernhaeuser, B. Jonson, G. T. Koldste, J. Konki, T. Kroll, R. Kruecken, D. Muecher, T. Nilsson, K. Nowak, J. Pakarinen, V. Pesudo, R. Raabe, K. Riisager, M. Seidlitz, O. Tengblad, H. Toernqvist, D. Voulot, N. Warr, K. Wimmer et al.
Study of bound states in Be-10 by one neutron removal reactions of Be-11.
Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **44** (4), 044009 (2017).
75. A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G. S. Simpson, P.-A. Soderstrom, T. Sumikama, J. Taprogge, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, K. Steiger et al.
Observation of a gamma-decaying millisecond isomeric state in Cd-128(80).
Physics Letters B **772**, 483-488 (2017).
76. M. Klintefjord, J. Ljungvall, A. Gorgen, S. M. Lenzi, F. L. B. Garrote, A. Blazhev, E. Clement, G. de France, J.P. Delaroche, P. Desesquelles, A. Dewald, D. T. Doherty, C. Fransen, A. Gengelbach, G. Georgiev, M. Girod, A. Goasduff, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, B. Jacquot, T. Konstantinopoulos, A. Korichi, A. Lemasson, J. Libert, A. Lopez-Martens, C. Michelagnoli, A. Navin, J. Nyberg, R. M. Perez-Vidal, S. Roccia, E. Sahin, I. Stefan, A. E. Stuchbery, M. Zielinska, D. Barrientos, B. Birkenbach, A. Boston, L. Charles, M. Ciemala, J.

- Dudouet, J. Eberth, A. Gadea, V. Gonzalez, L. Harkness-Brennan, H. Hess, A. Jungclaus, W. Korten, R. Menegazzo et al.
Measurement of lifetimes in Fe-62, Fe-64, Co-61, Co-63, and Mn-59.
 Physical Review C **95** (2), 024312 (2017).
77. A. Lauri, L. Velleman, X. Xiao, E. Cortés, J. B. Edel, V. Giannini, A. Rakovich, and S. A. Maier.
3D confocal raman tomography to probe field enhancements inside supercluster metamaterials.
 ACS Photonics **4**, 2070–2077 (2017).
78. C. M. Lazzarini, L. Tadzio, J. M. Fitzgerald, J. A. Sanchez-Gil and V. Giannini
Linear ultrafast dynamics of plasmon and magnetic resonances in nanoparticles.
 Physical Review B **96** (23), 235407 (2017).
79. M. Lettmann, V. Werner, N. Pietralla, P. Doornenbal, A. Obertelli, T. R. Rodríguez, K. Sieja, G. Authelet, H. Baba, D. Calvet, F. Chateau, S. Chen, A. Corsi, A. Delbart, J. M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, V. Lapoux, T. Motobayashi, M. Niikura, N. Paul, J. -Y. Rousse, H. Sakurai, C. Santamaria, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Uesaka, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. Bruce, R. J. Carroll, L. X. Chung, M. L. Cortés, M. Dewald, B. Ding, F. Flavigny, S. Franchoo, M. Gorska, A. Gottardo, A. Jungclaus, J. Lee, B. D. Linh, J. Liu, Z. Liu, C. Lizarazo et al.
Triaxiality of neutron-rich Ge-84, Ge-86, Ge-88 from low-energy nuclear spectra.
 Physical Review C **96** (1), 011301 (2017).
80. K. Li, J. M. Fitzgerald, X. Xiao, J. D. Caldwell, C. Zhang, S. A. Maier, X. Li, and V. Giannini.
Graphene Plasmon Cavities Made with Silicon Carbide.
 ACS Omega **2** (7), 3640–3646 (2017).
81. R. Lica, G. Benzoni, A.I. Morales, M.J.G. Borge, L. M. Fraile, H. Mach, M. Madurga, C. Sotty, V. Vedia, H. De Witte, J. Benito, T. Berry, N. Blasi, A. Bracco, F. Camera, S. Ceruti, V. Charviakova, N. Cieplicka-Orynczak, C. Costache, F. C. L. Crespi, J. Creswell et al.
Beta decay studies of n-rich Cs isotopes with the ISOLDE Decay Station.
 Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **44** (5), 054002 (2017).
82. R. Lica, F. Rotaru, M. J. G. Borge, S. Grevy, F. Negoita, A. Poves, O. Sorlin, A. N. Andreyev, R. Borcea, C. Costache, H. De Witte, L. M. Fraile, P. T. Greenlees, M. Huyse, A. Ionescu, S. Kisiov, J. Konki, I. Lazarus, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, C. Mihai, R. E. Mihai, A. Negret, R. D. Page, J. Pakarinen, S. Pascu, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, A. Serban, C. O. Sotty, L. Stan, M. Stanoiu, O. Tengblad, A. Turturica, P. Van Duppen, R. Wadsworth and N. Warr.
Identification of the crossing point at N=21 between normal and intruder configurations.
 Physical Review C **95** (2), 021301 (2017).
83. E. López-Tobar, B. Hernández, A. Chenal, Y.-M. Coic, J. Gómez Santos, E. Mejia-Ospino, J. V. García-Ramos, M. Ghomi, and S. Sánchez-Cortés.
Large size citrate-reduced gold colloids appear as optimal SERS substrates for cationic peptides.
 Journal of Raman Spectroscopy **48**(1), 30-37(2017).
84. A.I. Morales, G. Benzoni, H. Watanabe, Y. Tsunoda, T. Otsuka, S. Nishimura, F. Browne, R. Daido, P. Doornenbal, Y. Fang, G. Lorusso, Z. Patel, S. Rice..., J. Taprogge, et al.
Type II shell evolution in A = 70 isobars from the N ≥ 40 island of inversion.
 Physics Letters, Section B **765**, 328 (2017).
85. B. Olaizola, L.M. Fraile, H. Mach, A. Poves, A. Aprahamian, J.A. Briz, J. Cal-González, D. Ghita, U. Koster, W. Kurcewicz, S.R. Leshner, D. Pauwels, E. Picado, D. Radulov, G.S. Simpson and J.M. Udías.
Beta decay of Mn-66 to the N=40 nucleus Fe-66
 Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, **44** (12), 125103 (2017).
86. B. Olaizola, L.M. Fraile, H. Mach, A. Poves, F. Nowacki, A. Aprahamian, J.A. Briz, J. Cal-González, D. Ghița, U. Köster, W. Kurcewicz, S.R. Leshner, D. Pauwels, E. Picado, D. Radulov, G.S. Simpson and J.M. Udías.
Search for shape-coexisting 0+ states in Ni 66 from lifetime measurements.
 Physical Review C **95** (6), 061303 (2017).

87. J. Park, R. Krucken, D. Lubos, R. Gernhaeuser, M. Lewitowicz, S. Nishimura, D. S. Ahn, H. Baba, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, I. Celikovic, G. de France, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovannozzo, N. Goel, M. Gorska, H. Grawe, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y. K. Kim, I. Kojouharov et al.
Properties of gamma-decaying isomers and isomeric ratios in the Sn-100 region.
Physical Review C **96** (4), 044311 (2017).
Publisher's Note: Properties of gamma- decaying isomers and isomeric ratios in the Sn-100 region (vol 96, 044311, 2017).
88. S.-G. Park, C. Mun, X. Xiao, A. Braun, S. Kim, V. Giannini, S. A. Maier, and D.-H. Kim.
Surface Energy-Controlled SERS Substrates for Molecular Concentration at Plasmonic Nanogaps.
Advanced Functional Materials **27** (41), 1703376 (2017).
89. Z. Patel, P.M. Walker, Z. Podolyák, P.H. Regan, T.A. Berry,...J. Taprogge, et al.
Isomer-delayed γ -ray spectroscopy of A=159-164 midshell nuclei and the variation of K -forbidden E1 transition hindrance factors
Physical Review C **96** (3), 034305 (2017).
90. N. Paul, A. Corsi, A. Obertelli, P. Doornenbal, G. Authalet, H. Baba, B. Bally, M. Bender, D. Calvet, F. Chateau, S. Chen, J.-P. Delaroche, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, M. Girod, P.-H. Heenen, V. Lapoux, J. Libert, T. Motobayashi, M. Niikura, T. Otsuka, T. R. Rodriguez, J.-Y. Rousse, H. Sakurai, C. Santamaria, N. Shimizu, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Togashi, Y. Tsunoda, T. Uesaka, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. M. Bruce, R. Carroll, L. X. Chung, M. L. Cortes, M. Dewald, B. Ding, F. Flavigny, S. Franchoo, M. Gorska, A. Gottardo, A. Jungclaus, J. Lee et al.
Are There Signatures of Harmonic Oscillator Shells Far from Stability? First Spectroscopy of Zr-110.
Physical Review Letters **118** (3), 032501(2017).
91. V. Pesudo, M. J. G. Borge, A. M. Moro, J. A. Lay, E. Nácher, J. Gómez-Camacho, O. Tengblad, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, C. Andreoiu, P. C. Bender, R. Braid, M. Cubero, A. Di Pietro, J. P. Fernández-García, P. Figuera et al.
Scattering of the Halo Nucleus Be-11 on Au-197 at Energies around the Coulomb Barrier.
Physical Review Letters **118** (15), 152502 (2017).
92. V. Pesudo, M. J. G. Borge, A. M. Moro, J. A. Lay, E. Nácher, J. Gómez-Camacho, O. Tengblad, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Álvarez, C. Andreoiu, P. C. Bender, R. Braid, M. Cubero, A. Di Pietro, J. P. Fernández-García, P. Figuera et al.
Scattering of the Halo Nucleus ^{11}Be on ^{197}Au at Energies around the Coulomb Barrier: The case of ^{11}Be on ^{197}Au .
EPJ Web of Conferences **163**, 00045 (2017).
93. D. Ralet, S. Pietri, T. Rodríguez, M. Alaqeel, T. Alexander, N. Alkhomashi, F. Ameil, T. Arici, A. Atac, R. Avigo, T. Back, D. Bazzacco, B. Birkenbach, P. Boutachkov, B. Bruyneel, A. M. Bruce, F. Camera, B. Cederwall, S. Ceruti, E. Clement, M. L. Cortes, D. Curien, G. De Angelis, P. Desesquelles, M. Dewald, F. Didierjean, C. Domingo-Pardo, M. Doncel, G. Duchene, J. Eberth, A. Gadea, J. Gerl, F. G. Moradi, H. Geissel, T. Goigoux, N. Goel, P. Golubev, V. Gonzalez, M. Gorska, A. Gottardo, E. Gregor, G. Guastalla, A. Givchev, T. Habermann, M. Hackstein, L. Harkness-Brennan, G. Henning, H. Hess, T. Huyuk, J. Jolie, D. S. Judson, A. Jungclaus, R. Knoebel, I. Kojouharov et al.
Lifetime measurement of neutron-rich even-even molybdenum isotopes.
Physical Review C **95** (3), 034320 (2017).
94. M. Romanini, J. L. Tamarit, L. C. Pardo, F. J. Bermejo, R. Fernández-Perea and F. L. Pratt.
Implanted muon spin spectroscopy on 2-O-adamantane: a model system that mimics the liquid -> glasslike transitions.
Journal of Physics-Condensed Matter **29** (8), 085405 (2017).
95. B. Rubio, W. Gelletly, A. Algora, E. Nacher and J. L. Tain.
Beta decay studies with total absorption spectroscopy and the Lucrecia spectrometer at ISOLDE.
Journal of Physics G-Nuclear and Particle Physics **44** (8), 084004 (2017).
96. E. Sahin, F.L. Bello Garrote, Y. Tsunoda, T. Otsuka, G. De Angelis, A. Görgen, M. Niikura, S. Nishimura, Z.Y. Xu, H. Baba, F. Browne..., J. Taprogge, et al.
Shell Evolution towards Ni 78: Low-Lying States in Cu 77.
Physical Review Letters **118** (24), 242502 (2017).

97. C. M. Shand, Zs. Podolyak, M. Gorska, P. Doornenbal, A. Obertelli,...A. Jungclaus, *et al.*
Shell evolution beyond $Z=28$ and $N=50$: Spectroscopy of $Zn-81, Zn-82, Zn-83, Zn-84$.
Physics Letters B **773**, 492-497 (2017).
98. G. Siroki, P. D. Haynes, D. K. Lee, and V. Giannini.
Protection of surface states in topological nanoparticles.
Physical Review Materials **1** (2), 024201 (2017).
99. G. Siroki, P. A. Huidobro, and V. Giannini.
Topological photonics: From crystals to particles.
Physical Review B **96** (4), 041408 (2017).
100. Sumikama, T., Nishimura, S., Baba, H., Browne..., J. Taprogge, *et al.*
Observation of new neutron-rich Mn, Fe, Co, Ni, and Cu isotopes in the vicinity of Ni 78.
Physical Review C **95** (5), 051601 (2017).
101. J.L. Tain, V. Guadilla, E. Valencia, A. Algora, A.A. Zakari-Issoufou, S. Rice, L. Le Meur, J. Agramunt, J. Äystö, L. Batist, M. Bowry, J.A. Briz, V.M. Bui, R. Caballero-Folch, D. Cano-Ott, A. Cucoanes, V.-V. Elomaa, T. Eronen, E. Estevez, M. Estienne, M. Fallot, G.F. Farrelly, L.M. Fraile, E. Ganioglu, A.R. García, W. Gelletly, B. Gómez-Hornillos, D. Gorelov, V. Gorlychev, J. Hakala, A. Jokinen, M.D. Jordan, A. Kankainen, V.S. Kolhinen, F.G. Kondev, J. Koponen, M. Lebois, T. Martínez, P. Mason, E. Mendoza, M. Monserrate, A. Montaner-Pizá, I. Moore, E. Nacher, S.E.A. Orrigo *et al.*
Strong γ -ray emission from neutron unbound states populated in β -decay: Impact on (n,γ) cross-section estimates.
EPJ Web of Conferences **146**: 01002 (2017).
102. M. Vandebrouck, A. Lepailleur, O. Sorlin, T. Aumann, C. Caesar, M. Holl, V. Panin, F. Wamers, S. R. Stroberg, J. D. Holt, F. D. O. Santos, H. Alvarez-Pol, L. Atar, V. Avdeichikov, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, S.K. Bogner, J. M. Boillos, K. Boretzky, M.J.G. Borge, M. Caamano, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, M. Chartier *et al.*
Effective proton-neutron interaction near the drip line from unbound states in $F-25, F-26$.
Physical Review C **96** (5), 054305 (2017).
103. V. Vaquero, A. Jungclaus, P. Doornenbal, K. Wimmer, A. Gargano, J. A. Tostevin, S. Chen, E. Nacher, E. Sahin, Y. Shiga, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, Z. Y. Xu, T. Ando, H. Baba, F. L. Garrote, S. Franchoo, K. Hadynska-Klek, A. Kusoglu, J. Liu, T. Lokotko, S. Momiyama *et al.*
Gamma Decay of Unbound Neutron-Hole States in $Sn-133$.
Physical Review Letters **118** (20), 202502 (2017).
104. V. Vedia, V. Pazyi, L.M. Fraile, H. Mach, W.B. Walters, A. Aprahamian, C. Bernards, J.A. Briz, B. Bucher, C.J. Chiara, Z. Dlouhý, I. Gheorghe, D. Ghiță, P. Hoff, J. Jolie, U. Köster, *et al.*
Search for the $Ga-73$ ground-state doublet splitting in the β decay of $Zn-73$.
Physical Review C **96** (3), 034311 (2017).
105. A. Vispa, M. Romanini, M. A. Ramos, L. C. Pardo, F. J. Bermejo, M. Hassaine, A. I. Krivchikov, J. W. Taylor and J. L. Tamarit.
Thermodynamic and Kinetic Fragility of Freon 113: The Most Fragile Plastic Crystal.
Physical Review Letters **118** (10), 105701 (2017).
106. A. Vogt, B. Birkenbach, P. Reiter, A. Blazhev, M. Siciliano, K. Hadynska-Klek, J. J. Valiente-Dobon, C. Wheldon, E. Teruya, N. Yoshinaga, K. Arnsward, D. Bazzacco, M. Bowry, A. Bracco, B. Bruyneel, R. S. Chakrawarthy, R. Chapman, D. Cline, L. Corradi, F. C. L. Crespi, M. Cromaz, G. de Angelis, J. Eberth, P. Fallon, E. Farnea, E. Fioretto, S. J. Freeman, B. Fu, A. Gadea, K. Geibel, W. Gelletly, A. Gengelbach, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, A. B. Hayes, H. Hess, R. Hirsch, H. Hua, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, L. Kaya, W. Korten, I. Y. Lee, S. Leoni *et al.*
Isomers and high-spin structures in the $N=81$ isotones $Xe-135$ and $Ba-137$.
Physical Review C **95** (2), 024316 (2017).
107. A. Vogt, M. Siciliano, B. Birkenbach, P. Reiter, K. Hadynska-Klek, C. Wheldon, J. J. Valiente-Dobon, E. Teruya, N. Yoshinaga, K. Arnsward, D. Bazzacco, A. Blazhev, A. Bracco, B. Bruyneel, R. S. Chakrawarthy, R. Chapman, D. Cline, L. Corradi, F. C. L. Crespi, M. Cromaz, G. de Angelis, J. Eberth, P. Fallon, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, S. J. Freeman, B. Fu, A. Gadea, W. Gelletly, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, A. B.

- Hayes, H. Hess, R. Hetzenegger, R. Hirsch, H. Hua, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, V. Karayonchev, L. Kaya, W. Korten, I. Y. Lee, S. Leoni et al.
High-spin structures in Xe-132 and Xe-133 and evidence for isomers along the N=79 isotones.
 Physical Review C **96** (2), 024321 (2017).
108. P. Voss, T.E. Drake..., R. Orlandi, et al.
Doppler-shift attenuation lifetime measurement of the Ar 36 21+ level.
 Physical Review C, **96** (2), 024305 (2017).
109. J. Wu, S. Nishimura, G. Lorusso, P. Möller, E. Ideguchi, P.H. Regan, G.S. Simpson, P.A. Söderström, P.M. Walker, H. Watanabe, Z.Y. Xu, H. Baba...J. Taprogge, et al.
94 β -Decay Half-Lives of Neutron-Rich Cs 55 to Ho 67: Experimental Feedback and Evaluation of the r - Process Rare-Earth Peak Formation
 Physical Review Letters **118** (7), 072701 (2017).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MACROMOLECULAR/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

110. M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, R. Fort, A. de los Ríos, J. Wierzchos, M. V. Cañamares, M. Castillejo.
Influence of wavelength on the laser removal of lichens colonizing heritage stone.
 Applied Surface Science **399**, 758-768 (2017).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE PAMS (IFF-CSIC) / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE PAMS (IFF-CSIC) DEPARTMENT

111. R. Fernández-Perea, Luis F. Gómez, C. Cabrillo, M. Pi, A. O. Mitrushchenkov, A. F. Vilesov and M. P. de Lara-Castells.
Helium Droplet-Mediated Deposition and Aggregation of Nanoscale Silver Clusters on Carbon Surfaces.
 Journal of Physical Chemistry C **121**(40), 22248-22257 (2017).
112. M.P. de Lara-Castells, A. W. Hauser, A. O. Mitrushchenkov and R. Fernández-Perea.
Quantum confinement of molecular deuterium clusters in carbon nanotubes: ab initio evidence for hexagonal close packing.
 Physical Chemistry Chemical Physics **19** (42), 28621-28629 (2017).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

113. F. Colmenero, L.J. Bonales, J. Cobos, and V. Timón.
Density functional theory study of the structural, thermodynamic and vibrational properties of γ -UO₃ polymorph.
 Journal of Physical Chemistry C **121**, 14507 (2017).
114. F. Colmenero, L.J. Bonales, J. Cobos, and V. Timón.
Study of the thermal stability of studtite by in situ Raman spectroscopy and DFT calculations. Spectrochimica Acta - Part A **174**, 245 (2017).
115. F. Colmenero, L.J. Bonales, J. Cobos, and V. Timón.
Structural, mechanical and vibrational study of uranyl silicate mineral soddyite by DFT calculations.
 Journal of Solid State Chemistry **253**, 249 (2017).
116. F. Colmenero, L.J. Bonales, J. Cobos, and V. Timón.
Thermodynamic and mechanical properties of rutherfordine mineral based on density functional theory.
 Journal of Physical Chemistry C **121**, 5994 (2017).
117. J. L. Doménech, S. Schlemmer and O. Asvany
Accurate Frequency Determination of Vibration–Rotation and Rotational Transitions of SiH⁺
 The Astrophysical Journal **849**, 60 (2017).

118. J. L. Doménech.
Comment on 'Ab initio study: the potential energy curves and rovibrational spectrum of low-lying excited states of HCl⁺ cation' (Molecular Physics, 114:19, 2817–2823).
Molecular Physics **115**, 1465-1466 (2017).
119. R. Escribano, E. Artacho, A. Kouchi, T. Hama, Y. Kimura, H. Hidaka and N. Watanabe.
Simulations and spectra of water in CO matrices.
Physical Chemistry Chemical Physics **19**, 7280-7287 (2017).
120. P.C. Gómez and R. Escribano.
Vibrational spectra and physico-chemical properties of astrophysical analogs.
Physical Chemistry Chemical Physics **19**, 26582-26588 (2017).
121. T. Le, J. L. Doménech, M. Lepère, and H. Tran
Molecular dynamic simulations of N₂-broadened methane line shapes and comparison with experiments
The Journal of Chemical Physics **146**, 094305 (2017).
122. R.Z. Martínez, D. Bermejo, G. di Lonardo, and L. Fusina.
High resolution stimulated Raman spectroscopy from collisionally populated states after optical pumping: the $3\nu_2 \leftarrow 2\nu_2$ and $\nu_2 + 2\nu_4 + \nu_5 \leftarrow 2\nu_4 + \nu_5$ Q branches of $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ and the $3\nu_2 \leftarrow 2\nu_2$ Q branch of $^{12}\text{C}_2\text{D}_2$
Journal of Raman Spectroscopy **48**(2), 251-257 (2017).
123. R.Z. Martínez, D. Bermejo, G. di Lonardo, and L. Fusina.
High resolution stimulated Raman spectroscopy from collisionally populated states after optical pumping (II): $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$, $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_2$, $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$ and $^{13}\text{C}_2\text{D}_2$
Journal of Raman Spectroscopy **48**(8), 1020-1025 (2017).
124. B. Maté, G. Molpeceres, V. Timón, I. Tanarro, R. Escribano, J. C. Guillemin, J. Cernicharo, and V.J. Herrero.
Laboratory study of methyl isocyanate ices under astrophysical conditions.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **470**, 4222-4230 (2017).
125. G. Molpeceres, V. Timón, M. Jiménez-Redondo, R. Escribano, B. Maté, I. Tanarro and V.J. Herrero.
Structure and infrared spectra of hydrocarbon interstellar ice analogs
Physical Chemistry Chemical Physics **19**, 1352-1360 (2017).
126. G. Molpeceres, M.A. Satorre, J. Ortigoso, A. Zanchet, R. Luna, C. Millán, R. Escribano, I. Tanarro, V.J. Herrero and B. Maté.
Physical and spectroscopic properties of pure C₂H₄ and CH₄:C₂H₄ ices
Monthly Notices Royal Astronomy Society **466**, 1894-1902 (2017).
127. S. Montero
Molecular description of steady supersonic free jets
Physics of Fluids **29**, 096101 (2017).
128. C. S. Praveen, Lorenzo Maschio, Michel Rérat, V. Timon, and M. Valant.
BiVO₃: A Bi-based material with promising uv-visible light absorption properties
Physical Review B **96**, 165152 (2017).
129. M.A. Satorre, C. Millán, G. Molpeceres, R. Luna, B. Maté, M. Domingo, R. Escribano and C. Santonja.
Densities and refractive indices of ethane and ethylene at astrophysically relevant temperatures
Icarus **296**, 179-182 (2017).
130. A. Yurtsever, D. Fernández-Torre, J. Onoda, M. Abe, S. Morita, Y. Sugimoto, and R. Pérez.
The local electronic properties of individual Pt atoms adsorbed on TiO₂(110) studied by Kelvin probe force microscopy and first-principles simulations.
Nanoscale **9** (18), 5812 (2017).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

131. M. Criado, E. Rebollar, A. Nogales, T.A. Ezquerra, F. Boulmedais, C. Mijangos, and R. Hernández.
Quantitative nanomechanical properties of multilayer films made of polysaccharides through spray assisted Layer-By-Layer Assembly
Biomacromolecules **18** (1), 169 (2017).
132. J. Cui, A. Nogales, T.A. Ezquerra, and E. Rebollar.
Influence of substrate and film thickness on polymer LIPSS formation
Applied Surface Science **394**, 125 (2017).
133. P. Enrique-Jiménez, S. Quiles-Díaz, H.J. Salavagione, D. Wesner, H. Schönherr, J. González-Casablanca, R. García-Quismondo, G. Martínez, M.A. Gómez-Fatou, F. Ania and A. Flores.
Control of the structure and properties of SEBS nanocomposites via chemical modification of graphene with polymer brushes.
European Polymer Journal **97**, 1 (2017).
134. Araceli Flores.
Indentation in polymers.
Journal of Materials Education **39** (5-6), 173 (2017).
135. T.M Koller, J. Ramos, P.S. Schulz, I. G Economou, M.H. Rausch and A. P Fröba.
Thermophysical Properties of Homologous Tetracyanoborate-Based Ionic Liquids Using Experiments and Molecular Dynamics Simulations
The Journal of Physical Chemistry B **121**(16), 4145 (2017).
136. L. Latreche, N. Haddaoui, and M.E. Cagiao.
Calcium carbonate, kaolin and silica filled polypropylene/polystyrene blends: Influence of free quenching.
Revue Roumaine de Chimie **62** (3), 267 (2017).
137. J. Martín, A. Iturrospe, A. Cavallaro, A. Arbe, N. Stingelin, T. Ezquerra, C. Mijangos, and A. Nogales.
Relaxations and Relaxor-Ferroelectric-like Response of Nanotubularly Confined Poly(vinylidene fluoride)
Chemistry of Materials **29**(8), 3515 (2017).
138. D.E. Martínez-Tong, M. Sanz, T.A. Ezquerra, A. Nogales, M. Castillejo, and E. Rebollar.
Formation of polymer nanoparticles by UV pulsed laser ablation of poly (bisphenol A carbonate) in liquid environment
Applied Surface Science **418B**, 522, (2017).
139. A. Nogales, A. Del Campo, T.A. Ezquerra, and J. Rodríguez-Hernández.
Wrinkling and folding on patched elastic surfaces: Modulation of the chemistry and pattern size of microwrinkled surfaces
ACS Applied Materials & Interfaces **9**(23), 20188 (2017).
140. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, I. Janowska, R. Jedrzejewski, A. Linares, T.A. Ezquerra, H.D. Wagner, R. Tenne, and Z. Roslaniec.
Comparative study on the properties of poly(trimethylene terephthalate) -based nanocomposites containing multi-walled carbon (MWCNT) and tungsten disulfide (INT-WS2) nanotubes
Polymers for Advanced Technologies **28**(6), 645, (2017).
141. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, X.M. Sui, H.D. Wagner, A. Linares, A. Cirera, A. Varea, T.A. Ezquerra, and Z. Roslaniec.
Electrical conductivity and transparency of polymer hybrid nanocomposites based on poly(trimethylene terephthalate) containing single walled carbon nanotubes and expanded graphite
Journal of Applied Polymer Science **134**(1), 44370, (2017).
142. S. Paszkiewicz, I. Taraghi, A. Szymczyk, A. Huczko, M. Kurcz, B. Przybyszewski, R. Stanik, A. Linares, T.A. Ezquerra, and Z. Roslaniec.
Electrically and thermally conductive thin elastic polymer foils containing SiC nanofibers
Composites Science and Technology **146**, 20, (2017).

143. S. Quiles-Díaz, P. Enrique-Jiménez, D.G. Papageorgiou, F. Ania, A. Flores, I.A. Kinloch, M.A. Gómez-Fatou, R.J. Young, and H.J. Salavagione.
Influence of the chemical functionalization of graphene on the properties of polypropylene-based nanocomposites.
Composites Part A: Applied Science and Manufacturing **100**, 37 (2017).
144. R.I. Rodríguez-Beltrán, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, A. Nogales, T.A. Ezquerro, M. Castillejo P. Moreno, and E. Rebollar.
Laser induced periodic surface structures on polymer nanocomposites with carbon nanoadditives
Applied Physics A-Materials Science&Processing, **123** (11), 717 (2017).
145. J. Toudert, R. Serna, I. Camps, J. Wojcik, P. Mascher, E. Rebollar, and Ezquerro.
Unveiling the Far Infrared-to-Ultraviolet Optical Properties of Bismuth for Applications in Plasmonics and Nanophotonics.
Journal of Physical Chemistry C **121**(6), 3511 (2017).
146. J.F. Vega, J. Fernández-Alcázar, J.V. López, R.M. Michell, R.A. Pérez-Camargo, B. Ruelle, J. Martínez-Salazar, M.L. Arnal, P. Dubois and A.J. Müller.
Competition between supernucleation and plasticization in the crystallization and rheological behavior of PCL/CNT based nanocomposites and nanohybrids
Journal of Polymer Science: Polymer Physics **55**, 1310 (2017).
147. J.F. Vega, J. Ramos, V.L. Cruz, E. Vicente-Alique, E. Sánchez-Sánchez, A. Sánchez-Fernández, P. Hu, Y. Wang, J. Cortés, and J. Martínez-Salazar.
Molecular and hydrodynamic properties of human epidermal growth factor receptor HER2 extracellular domain and its homodimer: experiments and simulations
Biochimica et Biophysica Acta: General Subjects **1861**(9), 2406 (2017).
148. F. Zouai, F.Z. Benabid, S. Bouhelal, M.E. Cagiao, D. Benachour, and F.J. Baltá Calleja.
Nanostructure and morphology of poly(vinylidene fluoride)/polymethyl (methacrylate)/clay nanocomposites: correlation to micromechanical properties.
Journal of Materials Science **52**, 4345 (2017).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, R. Fort, A. de los Rios, J. Wierzechos, M.V. Cañamares and M. Castillejo.
Influence of wavelength on the laser removal of lichens colonizing heritage stone
Applied Surface Science **399**, 758 (2017).

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. A.N. Antonov, D.N. Kadrev, M.K. Gaidarov, P. Sarriuren, and E. Moya de Guerra.
Temperature Dependence of the Symmetry Energy and Neutron Skins in Ni, Sn, and Pb Isotopic Chains.
Bulgarian Journal of Physics **44**, S1 (2017).
ISSN: 1314-2666
2. G. Calcagni.
Detecting quantum gravity in the sky.
PoS(EPS-HEP2017)033. Proceedings of EPS-HEP 2017, European Physical Society conference on High Energy Physics, July 5-12, 2017, Venice, Italy (<https://pos.sissa.it/314/033>).

6.2.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

3. P. Enrique-Jiménez, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, F. Ania, and A. Flores.
Estudio del bandeo en esferulitas poliméricas mediante nanoindentación.
Revista de Plásticos Modernos **720**, 117 (2017).

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. A. N. Antonov, D.N. Kadrev, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Temperature dependence of the symmetry energy and neutron skins in Ni, Sn, and Pb isotopic chains.
Proceedings of the 36th International Workshop on Nuclear Theory, vol. 36, 95 (2017).
ISSN: 1313-2822
2. J. Fernando Barbero G. and Alejandro Pérez.
Quantum Geometry and Black holes.
100 Years of General Relativity.
ISBN: 978-981-3209-92-3 (hardcover).
3. G. Calcagni.
Detecting quantum gravity in the sky.
PoS(EPS-HEP2017)033. Proceedings of EPS-HEP 2017, European Physical Society conference on High Energy Physics, July 5-12, 2017, Venice, Italy (<https://pos.sissa.it/314/033>)
4. G. Calcagni.
Classical and Quantum Cosmology.
Springer, Suiza, 2017.
ISBN: 978-3-319-41125-5 (Print), 978-3-319-41127-9 (online).
<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-41127-9>
<http://www.springer.com/gp/book/9783319411255>
5. García-Benadí, J. del Río Fernández, M. Noguera-Cervera, C. Pulido de Torres, C. García Izquierdo, D. del Campo, S. Hernández, and P. Correda.
Traceable sea temperature vertical profile measured by optical fibers.
Oceans2017- Aberdeen. IEEE Xplore Digital Library.
DOI: [10.1109/OCEANSE.2017.8084718](https://doi.org/10.1109/OCEANSE.2017.8084718)

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

6. O. Tengblad, K. Peräjärvi, H. Toivonen and P. Gattinesi.
After-action Analysis of the Magic Maggiore Workshop on Expert Support and Reachback.
Publications Office of the European Union (2017). ISBN:978-92-79-75339-8
7. M. J. G. Borge.
Results of the ISOLDE Facility and the HIE-ISOLDE Project (pags. 162-172).
Proceedings of the Sixth International Conference on Fission and Properties of Neutron-Rich Nuclei.
World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2017). ISBN: 978-981-3229-41-9
8. B. López-Ruiz, C. Rueda, C. Sainz, M. Sánchez-Paniagua, and P. Sevilla.
Presentation of educational videos used as modern tools to help pharmacy students to understand chemical questions of analytics and physical chemistry.
INTED2017: 11th International technology, education and development conference. P. 4715 (2017).

9. B. López-Ruiz, C. Rueda, C. Sainz, M. Sánchez-Paniagua, and P. Sevilla.
Development of tutorial videos to guide students of pharmacy and optics and optometry to achieve academic abilities.
INTED2017: 11th International technology, education and development conference. P.4741 (2017).
10. O. Tengblad, K. Peräjärvi, H. Toivonen, and P. Gattinesi.
After-action Analysis of the Magic Maggiore Workshop on Expert Support and Reachback.
Publications Office of the European Union (2017). ISBN:978-92-79-75339-8

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

11. Aurelio Serrano and Víctor Herrero.
La Asociación Alexander von Humboldt de España y el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, relaciones actuales y nuevos ámbitos por explorar. Libro Conmemorativo de los XXV Años de la fundación de la Asociación Alexander von Humboldt de España.
IDOE –AVHE, p. 297 (2017).

6.4 TESIS DOCTORALES / PH.D. THESES

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

Title: Cosmología cuántica de lazos y campos fermiónicos

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 26th of June 2017.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Beatriz Elizaga de Navascués

Supervisor: Guillermo A. Mena Marugán and M. Martín Benito

Title: Highly correlated ab initio methods apply to the study of capture and storage of CO₂ and pollutants.
Spectroscopy of atmosphere and astrophysics species

University: Universidad Mohammed V -Agdal de Rabat, Marruecos

Date: 14th of March 2017

Mark: Très Honorable

Candidate: Samira Dalbouha

Supervisors: Najia Komiha and María Luisa Senent

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: Characterization of secondary phases of spent nuclear fuel under final geological disposal conditions:
theoretical and experimental studies

University: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Física

Date: 21st of September 2017

Mark: Sobresaliente cum Laude por unanimidad

Candidate: Francisco Colmenero Ruiz

Supervisor: Vicente Timón Salinero and Joaquín Cobos

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Propiedades físico-químicas de polímeros conjugados nanoestructurados y sus aplicaciones en células solares orgánicas / Physicochemical properties of nanostructured conjugated polymers and their applications in organic photovoltaics

Type: PhD thesis

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 22nd of September 2017

Mark: Sobresaliente cum Laude

Candidate: Álvaro Rodríguez Rodríguez

Supervisors: Mari Cruz García Gutiérrez, Esther Rebollar and Tiberio A. Ezquerro

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: Propiedades Gamow-Teller en los emisores doble beta ^{96}Zr , ^{100}Mo y ^{136}Xe

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 6th of October 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: María Benítez Galán

Supervisor: P. Sarriguren, O. Moreno, and E. Moya

Title: Simulation of Quantum Algorithms

Type: Trabajo Fin de Grado

University: Universidad Carlos III de Madrid

Date: 16th of October 2017

Mark: 9.1

Candidate: Guillermo García Matey

Supervisors: Jesús Fernando Barbero González and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

Title: On the stability of non-local theories

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 15th of September 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Sergio Díaz

Supervisor: Luis J. Garay and José A.R. Cembranos

Title: Combing a thermal bath

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 15th of July 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: José de Ramón

Supervisor: Luis J. Garay, Eduardo Martín-Martínez

Title: Campos cuánticos en espacio-tiempos curvos

Type: Trabajo Fin de Grado

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 15th of July 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Julio Arrechea

Supervisor: Luis J. Garay

Title: Campos cuánticos en espacio-tiempos curvos

Type: Trabajo Fin de Grado

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 15th of July 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Marta Rodríguez-Guerra

Supervisor: Luis J. Garay

Title: ¿Podemos escuchar la forma de un tambor?

Type: Trabajo Fin de Grado

University: Universidad Carlos III de Madrid

Date: 16th of September 2017

Mark: 5.9

Candidate: Carlos Blasco Navarro

Supervisor: Juan Margalef Bentabol

Title: Oscilación de neutrinos en el vacío

Type: Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Carmen Millá Pardo

Supervisor: Óscar Moreno Díaz

Title: Colisión elástica y detección directa de partículas de materia oscura con núcleos

Type: Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: June 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Tomás Sánchez Sánchez-Pastor

Supervisor: Óscar Moreno Díaz

6.5.3 **DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**

Title: “Diagnóstico de plasmas fríos de H2 He y Ar mediante espectroscopía óptica”

Type: Master thesis

University: Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Óptica y Optometría

Date: 20th of September, 2017

Mark: Sobresaliente

Candidate: Magín Parra Serrano

Supervisors: Ramón J. Peláez e Isabel Tanarro

6.5.4 **DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

Title: Nanopartículas y Nanocompuestos Poliméricos

Type: Master thesis

University: Universidad Internacional Menéndez Pelayo

Date: 21st of May 2017

Mark: 8.5

Candidate: Edgar Gutiérrez Fernández

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

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN / PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2012	2013	2014	2015	2016	2017
Number of ISI publications	182	179	187	155	159	148
Number of non-ISI publications	12	13	18	16	4	3
Total stock of PhD fellowships and contracts	18	22	22	18	16	18
Number of PhD Theses defended	8	5	8	7	8	4
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	57,4*	82,4*	32,9*	88*	89	57,3

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2016)
Advanced Functional Materials	1	12.124
Chemistry of Materials	1	9.466
Physical Review Letters	8	8.462
ACS Applied Materials and Interfaces	1	7.504
Nanoscale	1	7.367
ACS Photonics	2	6.756
Journal of High Energy Physics	2	6.063
Astrophysical Journal	2	5.533
European Physical Journal C	3	5.297
Biomacromolecules	1	5.246
Astronomy and Astrophysics	1	5.014
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	2	4.961
Composites Science and Technology	1	4.873
PHYSICS LETTERS B	6	4.807
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	1	4.734
Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects	1	4.702
Physical Review D	7	4.557
Journal of Physical Chemistry C	4	4.536
Food Chemistry	1	4.529
Advanced Materials Interfaces	1	4.279
Scientific Reports	3	4.259
Physical Chemistry Chemical Physics	6	4.123
Composites Part A: Applied Science and Manufacturing	1	4.075
Physical Review C	24	3.820
Physical Review B	7	3.767

Nuclear Physics B	1	3.678
European Polymer Journal	1	3.531
Applied Physics Letters	1	3.411
Applied Surface Science	3	3.387
Optics Express	1	3.307
Journal of Physical Chemistry B	1	3.177
Icarus	1	3.131
Classical and Quantum Gravity	3	3.119
Applied Clay Science	1	3.101
Journal of Raman Spectroscopy	4	2.969
Journal of Chemical Physics	2	2.965
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics	6	2.899
Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics	1	2.838
PLoS ONE	1	2.806
Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects	1	2.714
Journal of Physics-Condensed Matter	2	2.678
Journal of Materials Science	1	2.599
Spectrochimica Acta - Part A	1	2.536
International Journal of Modern Physics D	1	2.476
Annals of Physics	1	2.465
Physical Review E	1	2.366
Journal of Solid State Chemistry	1	2.299
Physics of Fluids	1	2.232
Polymers for Advanced Technologies	1	1.907
Molecular Physics	1	1.870
Journal of Applied Polymer Science	1	1.860
Computational and Theoretical Chemistry	1	1.549
Applied Physics A: Materials Science and Processing	1	1.455
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-	2	1.362
European Physical Journal D	1	1.288
Acta Physica Polonica, Series B	3	0.904
Few-Body Systems	3	0.877
Nuclear Technology	1	0.745
Journal of Materials Education	1	0.452
Revue Roumaine de Chimie	1	0.246
TOTAL:	142	Average Impact Factor: 3,99

Number of Journals: 60

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

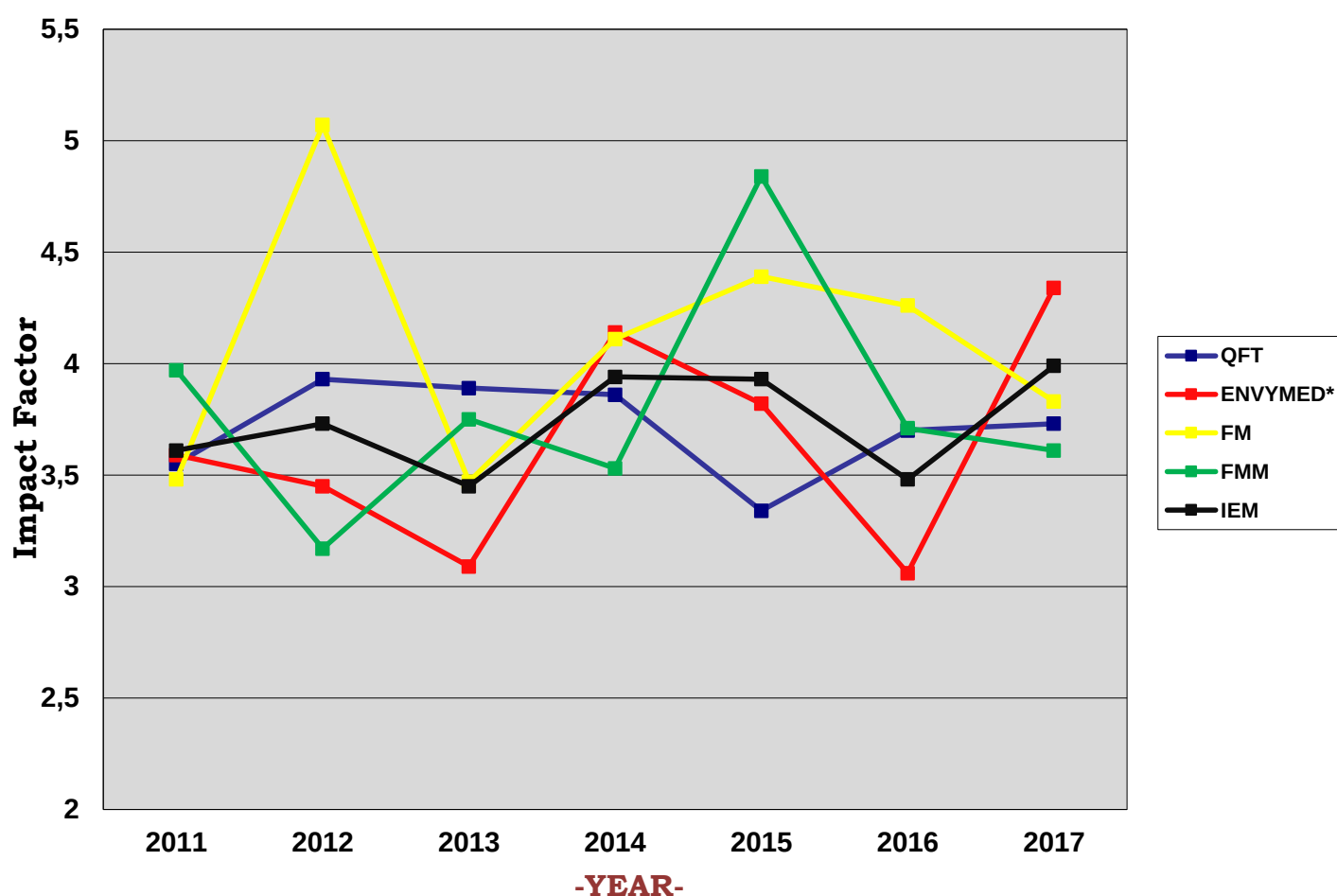
Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (QFT)

Molecular Physics (FM)

Macromolecular Physics (FMM)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (ENVYMED)



7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón & Cajal”		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1	1		1	2	1	1			10	4	14
ENVYMED	8	4				2	6	2	2	1	16	9	25
FM	10	2			1		2		2	1	15	3	18
FMM	5	5	1		1		2	2	2	1	11	8	19
ADMON.									2	8	2	8	10
IEM	30	12	2		3	4	11	5	8	11	54	32	86

¹“Authorized Stay” excluded

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

Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados /

Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 78

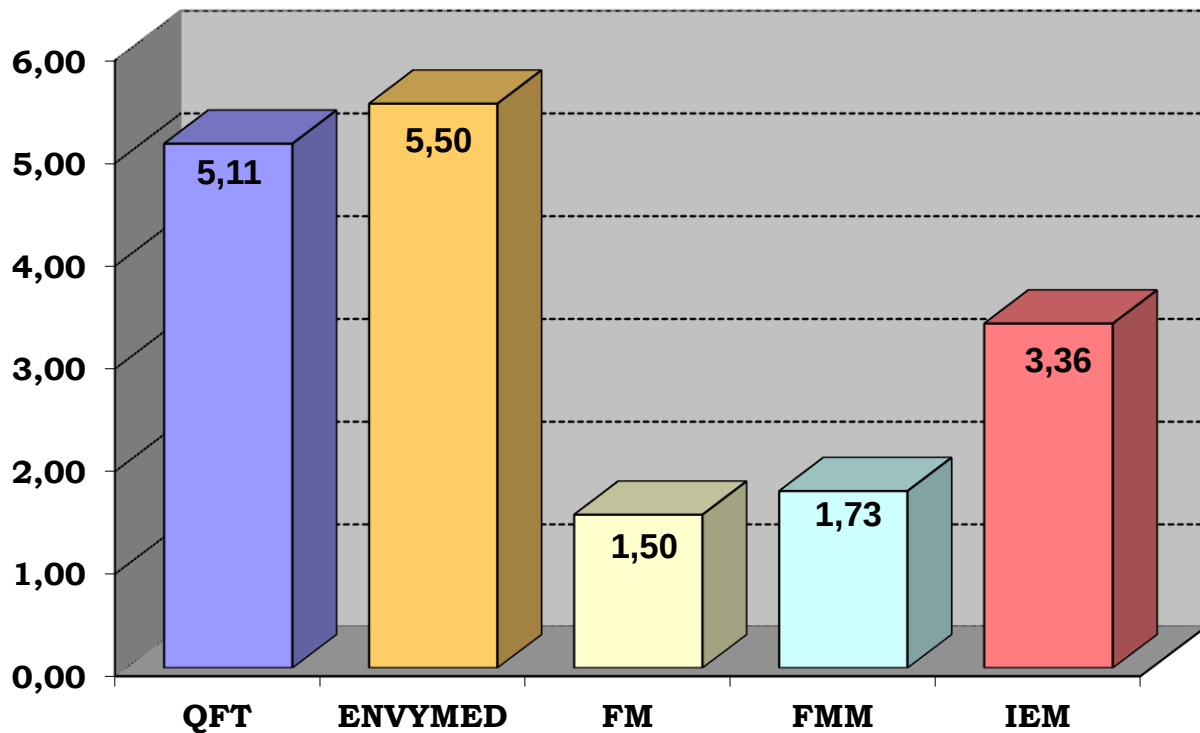
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	46	65(+1) ¹	18	18(+1) ¹	148
Other publications	2			1	3

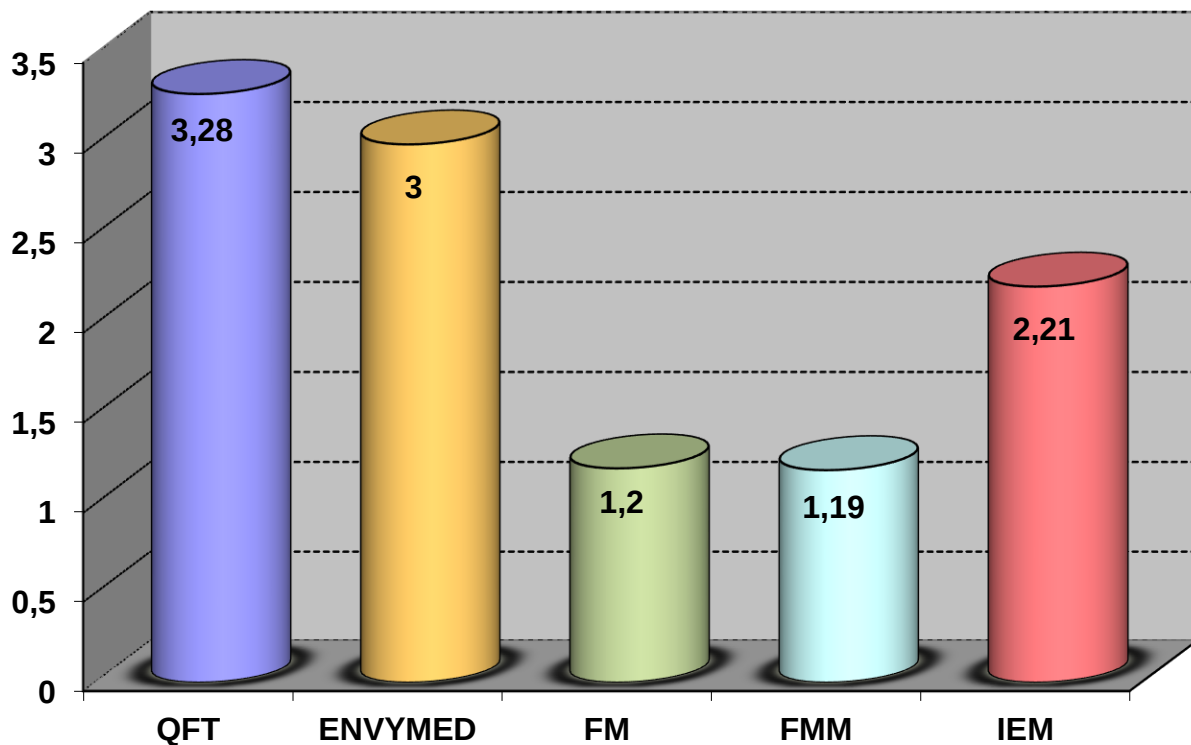
¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

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

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



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) / **Ratio by scientific staff** (excluding support staff):



- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior** / **Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher: 3,52**

Introducción	2
Introduction	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute.....	4
Dirección / Direction	5
Junta de Instituto / Institute Board.....	5
Claustro Científico / Scientific Staff.....	5
Departamentos de Investigación / Research Departments.....	7
Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	7
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	8
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	9
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC.....	11
 2A. Labor Investigadora	 12
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	13
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	20
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	30
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	37
 2B. Research Activities.....	 42
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department	43
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department.....	50
2B.3 Molecular Physics Department	59
2B.4 Macromolecular Physics Department.....	66
 3. Proyectos de Investigación / Research Grants	 71
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	72
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	73
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	75
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	77
 4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	 78
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	79
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	79
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	81

4.1.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	83
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	85
4.2	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	87
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	87
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	87
4.2.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	88
4.3	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences	88
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	88
4.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	90
4.3.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	90
4.4	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	90
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	90
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	91
4.4.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	92
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	93
5.1	Docencia / Teaching	94
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	94
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	95
5.1.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	96
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	96
5.2	Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	97
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	97
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	98
5.2.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	100
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	100
5.3	Premios y Otros Méritos / Awards	101
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	101
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	101
5.3.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	102
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	102
5.4	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	103
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	103

5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	107
5.4.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	107
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	108
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	108
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	108
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	109
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	109
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	109
5.6.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	109
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	109
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	111
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	112
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	112
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	115
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	121
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	123
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	124
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	124
6.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	125
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	125
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	125
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	125
6.3.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	126
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses.....	126
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	126
6.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	126
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	126
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	127
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	127
6.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	128
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	128

7.	Tablas y Datos / <i>Tables and Data</i>	129
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	130
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	130
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	132
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments.	133
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments.....	133
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments	134