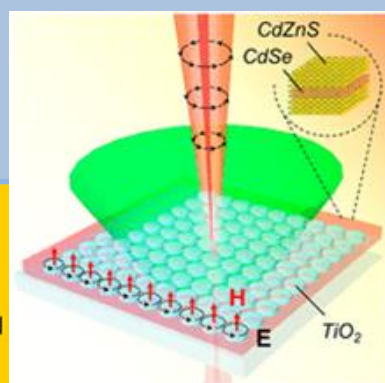
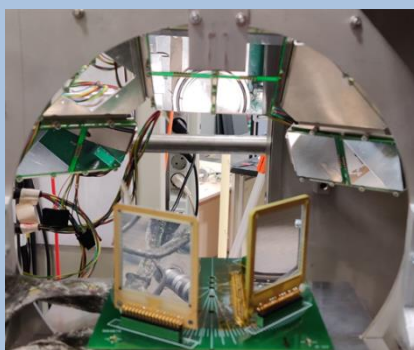
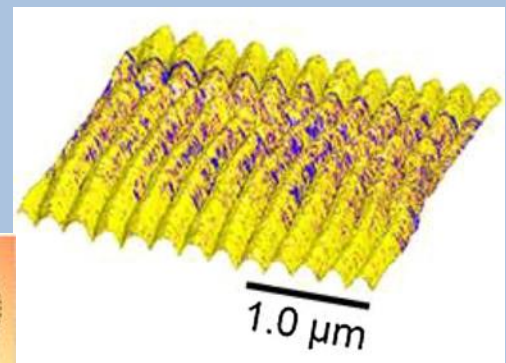
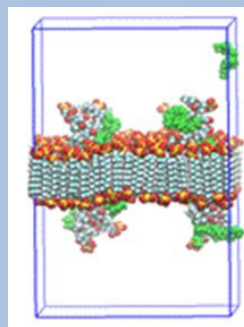
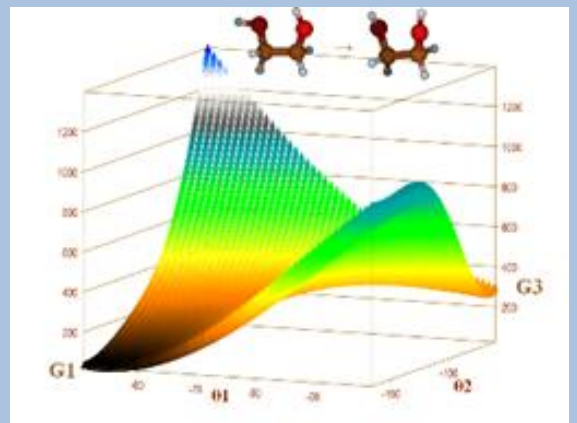
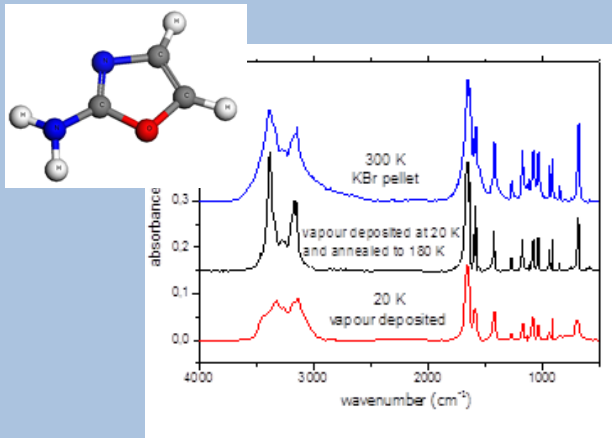


Instituto de Estructura de la Materia

Memoria 2020

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

# ANNUAL REPORT 2020





# MEMORIA ANUAL 2020

*SCIENTIFIC REPORT 2020*

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS  
C/ SERRANO, 113BIS, 119, 121, 123  
28006 MADRID  
TEF.: 91 561 68 00 FAX: 96 564 55 57  
WEB: [WWW.IEM.CSIC.ES](http://WWW.IEM.CSIC.ES)

# SUMARIO

---

<b>Introducción</b> .....	<b>6</b>
<b>Introduction</b> .....	<b>7</b>
<b>1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute</b> .....	<b>8</b>
Dirección / Direction .....	9
Junta de Instituto / Institute Board .....	9
Claustro Científico / Scientific Staff .....	9
Departamentos de Investigación / Research Departments .....	10
Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	10
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	11
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics .....	12
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics .....	13
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office .....	14
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC .....	14
<b>2A. Labor Investigadora</b> .....	<b>15</b>
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas .....	16
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados .....	23
2A.3 Dpto. de Física Molecular .....	33
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular .....	38
<b>2B. Research Activities</b> .....	<b>45</b>
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department .....	46
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department .....	53
2B.3 Molecular Physics Department .....	62
2B.4 Macromolecular Physics Department .....	67
<b>3. Proyectos de Investigación / Research Grants</b> .....	<b>73</b>
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	74
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	75
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	78
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	78

<b>4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation .....</b>	<b>80</b>
4.1 <b>Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....</b>	<b>81</b>
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	81
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.....	82
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	82
4.2 <b>Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors .....</b>	<b>83</b>
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	83
4.3 <b>Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....</b>	<b>83</b>
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	83
4.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	83
4.4 <b>Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions .....</b>	<b>83</b>
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	83
4.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	83
<b>5 Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities .....</b>	<b>84</b>
5.1 <b>Docencia / Teaching .....</b>	<b>85</b>
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	85
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	85
5.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	85
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	86
5.2 <b>Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars .....</b>	<b>86</b>
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	86
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	86
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	87
5.3 <b>Premios y Otros Méritos / Awards.....</b>	<b>87</b>
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	87
5.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	87
5.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	88
5.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	88

<b>5.4</b>	<b>Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material .....</b>	<b>89</b>
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	89
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	89
5.4.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	90
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	90
<b>5.5</b>	<b>Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology .....</b>	<b>92</b>
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	92
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	92
<b>5.6</b>	<b>Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities .....</b>	<b>93</b>
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	93
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	94
5.6.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	94
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	95
<b>6.</b>	<b>Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....</b>	<b>96</b>
<b>6.1</b>	<b>Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications .....</b>	<b>97</b>
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	97
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	100
6.1.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	107
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	109
<b>6.2</b>	<b>Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications .....</b>	<b>110</b>
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	110
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	110
6.2.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	110
<b>6.3</b>	<b>Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications .....</b>	<b>111</b>
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	111
6.3.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics .....	111
6.3.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	111
<b>6.4</b>	<b>Tesis Doctorales / PhD Theses.....</b>	<b>112</b>
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	112
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	112

<b>6.5</b>	<b>Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones / Master, Grade and Other Degrees Theses ...</b>	<b>112</b>
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry .....	112
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy .....	113
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics .....	113
<b>7.</b>	<b>Tablas y Datos / Tables and Data .....</b>	<b>114</b>
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan .....	115
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals .....	115
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments .....	117
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments .....	118
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments .....	118
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments .....	119

## 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 2020, 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 Informática, Mantenimiento, Almacén, 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 2020 en 138 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 2020, 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 Computing, Maintenance and Warehouse 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 2020, has crystallized in 138 ISI publications.



**Capítulo 1**

**ESTRUCTURA DEL INSTITUTO**

*Chapter 1*

*INSTITUTE ORGANIZATION*

**DIRECCIÓN / DIRECTION****Director / Director:** Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán**Vicedirector 1º / Assistant Director 1<sup>st</sup>:** Prof. Tiberio Ezquerra Sanz**Vicedirector 2º / Assistant Director 2<sup>nd</sup>:** Dr. José M. Fernández Sánchez**Gerente / Manager:** D<sup>a</sup>. Isabel Llerena de Frutos**JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD****Presidente / President:** Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán**Secretaria / Secretary:** D<sup>a</sup>. Isabel Llerena de Frutos**Vocales / Members:**

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof<sup>a</sup>. M<sup>a</sup> José García Borge

Prof. José González Carmona

Dra. M<sup>a</sup> Belén Maté Naya

Dr. Rafael Molina Fernández

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

**CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF****Presidente / President:** Dr. Guillermo A. Mena Marugán**Secretario / Secretary:** Dr. Vincenzo Giannini**Personal Investigador / Scientific staff:**

Dr. J. Fernando Barbero González

Dr. José Antonio Briz Monago

Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. M<sup>a</sup> Vega Cañamares Arribas

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof<sup>a</sup>. María José García Borge

Dra. María Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dra. M<sup>a</sup> del Sagrario Martínez Ramírez

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Dra. Belén Maté Naya

Dr. Rafael A. Molina Fernández

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Christophe Rappold

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

Dra. M<sup>a</sup> Luisa Senent Diez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Guzmán Tejada Gala

Prof. Olof E. I. Tengblad

Dr. Vicente Timón Salinero

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Dra. Kathrin Wimmer



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

**Jefa del Departamento / Head of Department:**

Profª. Mª José García Borge

Profesora de Investigación / *Research Professor*

**Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vincenzo Giannini

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Kathrin Wimmer

Investigadora Contratada Ramón y Cajal /  
*Tenure Track Contract R&C*

Dr. Christophe Marie Jean Rappold

Postdoctoral (Atracción Talento Investigador CM desde 1 de marzo) / *Postdoc Contract (since March 1<sup>st</sup>)*

Dr. José Antonio Briz Monago

Postdoctoral (Contratado con cargo a proyecto) /  
*Project Postdoc Contract*

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada (jubilación 30 de noviembre) / *Adjoint Researcher (retired November 30<sup>th</sup>)*

D. Álvaro Fernández Martínez

Titulado Superior Contratado (con cargo a proyecto) /  
*University Graduate*

D. Vicente García Távora

Titulado Superior Contratado (cargo a proyecto desde 16 de octubre) / *University Graduate (since October 16<sup>th</sup>)*

Dr. Moisés Martín Garrido

Titulado Superior Contratado (hasta 29 de febrero) /  
*University Graduate (until November 29<sup>th</sup>)*

D. Álvaro Buendía Gallego

Contratado Predoctoral (FPI desde 1 de octubre) /  
*PhD Fellowship (FPI since October 1<sup>st</sup>)*

D. Javier Díaz Ovejas

Contratado Predoctoral (FPI) / *PhD Fellowship (FPI)*

D. Samuel Escrig López

Contratado Predoctoral (CM desde 1 de septiembre) / *PhD Fellowship (CM since September 1<sup>st</sup>)*

D. Diego Romero Abujetas

Contratado Predoctoral (FPU hasta 15 de diciembre) / *PhD Fellowship (FPU until December 15<sup>th</sup>)*

Dª Silvia Viñals Onses

Contratado Predoctoral (cargo a proyecto hasta 30 de septiembre) / *PhD Fellowship (until September 30<sup>th</sup>)*

D. Salvatore Caterino

Estancia Temporal ERASMUS / *Authorized Stay*

D. Marcelo José Dos Santos Oliveira

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

**Personal de apoyo / Support Staff:**

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Superior Especializado OPIS (desde el 29 de diciembre) / *Specialized University Graduate (since December 29<sup>th</sup>)*

Dª. Purificación Corchete Corchete

Ayudante Investigación OPIS/ *Research Assistant OPIS*

Dª. Jessica Roldán Coronel

Contrato GARJUR (desde 16 de marzo) /  
*Contract GARJUR (since March 16<sup>th</sup>)*

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR**  
**MOLECULAR PHYSICS**

**Jefa del Departamento / Head of Department:**

Dra. M<sup>a</sup> Belén Maté Naya Científica Titular / *Tenured Scientist*

**Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Dionisio Bermejo Plaza Profesor de Investigación (jubilación 12 de enero) / *Research Professor (retired January 12<sup>th</sup>)*

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. Juan Ortigoso Martínez Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Julio Francisco Santos Gómez Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Guzmán Tejeda Gala Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vicente Timón Salinero Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Miguel Jiménez Redondo Titulado Superior Contratado (hasta 15 de mayo) / *University Graduate (until May 15<sup>th</sup>)*

D. Carlos Álvarez Nicolás Contratado Predoctoral (FPI desde 1 de julio) / *PhD Fellowship (since July 1<sup>st</sup>)*

D. Denis Paredes Roibás Otros (Estudiante de Doctorado) / *Others (PhD Student)*

**Personal de apoyo / Support Staff:**

D. Miguel Ángel Moreno Alba Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPIs*

D. Ángel Luis González Valdenebro Técnico Especializado de OPI / *Specialist Technician OPIs*

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR**  
**MACROMOLECULAR PHYSICS**

**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / *Tenured Scientist*

**Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Tiberio A Ezquerro

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular (jubilación 11 de febrero) /  
*Tenured Scientist (retired February 11<sup>th</sup>)*

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Victor Luis Cruz Cañas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. M<sup>a</sup> Cruz García Gutiérrez

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular (desde 15 de julio) /  
*Tenured Scientist (since July 15<sup>th</sup>)*

D<sup>a</sup>. Marianela Gómez Toledo

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

**Personal de apoyo / Support Staff:**

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

Dra. Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

## UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA FINANCES AND ADMINISTRATION

D <sup>a</sup> . M <sup>a</sup> Isabel Llerena de Frutos	C. Técnico Especializado de OPI / <i>Specialist Technician OPIs</i>
D <sup>a</sup> . Rosario Carrasco Nicolás	C. Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D <sup>a</sup> . Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D <sup>a</sup> . Alicia Fernández Clavero	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D <sup>a</sup> . Ana María García Arribas	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D <sup>a</sup> . Carmen García Collado	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D <sup>a</sup> . Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D <sup>a</sup> . Isabel Lombán Botello	C. Auxiliar OO.AA. (jubilación 3 de septiembre) / <i>Auxiliary OO.AA. (retired on September 3<sup>rd</sup>)</i>
D <sup>a</sup> . Concepción Nieto Serrano	C. Técnicos Auxiliares Informática Admon. del Estado / <i>IT Technical Auxiliaries</i>

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

### ALMACÉN / WAREHOUSE

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

### CONSERJERÍA / RECEPTION

D <sup>a</sup> . Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</i>
D <sup>a</sup> . Cristina Peco Marco	Ayudante Gestión y Servicios Comunes (hasta 30 de septiembre) / <i>Common Services Assistant (until September 30<sup>th</sup>)</i>

### INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

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

### MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

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

### TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano	Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
--------------------------------	--

### TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco	Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mantenimiento y Profesionales / <i>Technical and Professional Activities Technician</i>
---------------------------	--

## **Capítulo 2A**

### **LABOR INVESTIGADORA**



## 2A.1. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravitación y Cosmología.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Física Molecular Teórica aplicada al estudio de especies astrofísicas y a la caracterización de contaminantes atmosféricos.
- Teoría de la Materia Condensada.

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Cosmología Cuántica de Lazos.
- Teoría Cuántica de Campos en Espaciotiempos Curvos.
- Gravedad cuántica no-local.
- Espaciotiempos multiescala.
- Ondas gravitacionales (Consortio LISA).
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares no-rígidas de interés astrofísico y atmosférico.
- Formación de Compuestos Orgánicos Volátiles a partir de radicales orgánicos.
- Fotodisociación de radicales orgánicos.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados
- Modelos integrables cuánticos
- Materia cuántica topológica.
- Termodinámica cuántica.

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Combinatoria y teoría de números.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hiperesféricos.
- Métodos ab initio altamente correlacionados y nuevas herramientas computacionales.

### LABOR INVESTIGADORA:

#### GRAVITACIÓN

El Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado su investigación en Cosmología Cuántica de Lazos y su aplicación al Universo primitivo, investigando las consecuencias sobre las perturbaciones cosmológicas. Las perturbaciones estudiadas no son solo perturbaciones de la geometría, sino también de campos escalares (que conducen a perturbaciones primordiales escalares y tensoriales) y de campos fermiónicos.

Durante este año, gran parte del trabajo se ha dedicado a la consideración de una regularización alternativa de la ligadura hamiltoniana de la Cosmología Cuántica de Lazos, diferente a la que se propuso originalmente en la literatura. Esta alternativa se denomina con frecuencia como regularización de Dapor-Liegner para la Cosmología Cuántica de Lazos. En años pasados, ya habíamos discutido su implementación en una cosmología homogénea e isótropa, obteniendo una descripción cuántica de un Universo como el nuestro en promedio. En 2020 hemos ampliado este estudio a cosmologías homogéneas y anisótropas y, además, a cosmologías perturbadas que contienen pequeñas anisotropías e inhomogeneidades. Usando el formalismo de

cuantización híbrida en el marco de la Cosmología Cuántica de Lazos, formalismo que fue introducido hace unos diez años por nuestro grupo, hemos obtenido las ecuaciones dinámicas que gobiernan la propagación de las perturbaciones cosmológicas en el Universo primordial, que contienen correcciones cuánticas que son importantes en épocas remotas cercanas a lo que clásicamente llamaríamos el Big Bang. Estas ecuaciones dinámicas son similares a las ecuaciones encontradas en la Relatividad General, pero la masa efectiva dependiente del tiempo que sienten las perturbaciones difiere del resultado de la teoría einsteiniana cuando los efectos de la geometría cuántica son importantes. Hemos analizado el comportamiento de esta masa efectiva, en particular alrededor del rebote que reemplaza al Big Bang en la Cosmología Cuántica de Lazos. Hemos demostrado que esta masa tiene un buen comportamiento en el formalismo híbrido para la cuantización, mientras que este no es el caso en otros formalismos (como, por ejemplo, el llamado formalismo de métrica vestida). Estos resultados permiten un tratamiento detallado de las perturbaciones primordiales con garantías de éxito en la cuantización de Loops con la nueva regularización, incluido el cálculo de los espectros de potencia para las perturbaciones, que podrían compararse con observaciones.

Otra parte importante de nuestro trabajo se ha centrado en la discusión de perturbaciones fermiónicas correspondientes a un campo de Dirac. En particular, hemos mostrado cómo el criterio de diagonalización hamiltoniana asintótica, originado en la Cosmología Cuántica de Lazos híbrida, sirve para seleccionar un vacío único para el campo de Dirac en las cosmologías de tipo de Sitter, en el contexto de teoría cuántica de campos en espaciotiempos curvos. El criterio empleado se basa en alcanzar una definición dinámica adecuada de las variables de creación y destrucción para el campo fermiónico, con un hamiltoniano asociado que resulte ser asintóticamente diagonal. Esto conduce a variables fermiónicas que poseen una expansión asintótica precisa en el límite ultravioleta de grandes números de onda. Hemos demostrado que, cuando el fondo cosmológico se fija como una solución de Sitter, esta expansión determina completamente la elección de las variables de creación y destrucción fermiónicas para todas las escalas espaciales, y por lo tanto selecciona una representación de Fock privilegiada y un estado de vacío para el campo de Dirac.

También hemos investigado la producción gravitatoria de materia oscura acoplada a la curvatura durante las épocas inflacionaria y de recalentamiento. Hemos desarrollado una aproximación analítica para describir el efecto relevante de resonancia y sus consecuencias en el régimen ultravioleta permitiéndonos así constreñir los posibles valores de los valores fenomenológicos del campo que estamos considerando como candidato a materia oscura.

Hemos investigado los efectos de la polarización del vacío en espaciotiempos esféricamente simétricos, estáticos y vacíos. Comenzamos con la aproximación de Polyakov para el tensor de energía-momento renormalizado y encontramos todas las soluciones a las ecuaciones del campo semiclásicas en vacío. La contrapartida a la geometría clásica de Schwarzschild reemplaza la presencia de un horizonte de sucesos por la garganta de un agujero de gusano que conecta una región externa asintóticamente plana con una región asintótica interna que posee una singularidad desnuda: no hay ninguna solución semiclásica de vacío con superficies de Cauchy. Hemos analizado espaciotiempos asintóticamente planos y esféricamente simétricos en los que aparece un horizonte de sucesos sin superficies atrapadas encontrando dos tipos diferentes, cada uno de ellos relacionado con el comportamiento de uno de los dos grados de libertad de la métrica. El resultado es que casi siempre aparece un horizonte de Cauchy más allá del cual se puede extender la métrica, mientras que el otro es inextensible pero tiene dos regiones asintóticas futuras nulas a cada lado del horizonte. También hemos estudiado las condiciones de energía que debe satisfacer la materia en las proximidades del horizonte.

Hemos analizado la cuantización de un campo escalar en presencia de un campo electromagnético clásico externo y hemos encontrado una representación de natural de Fock que admite una implementación unitaria de la dinámica del campo cuántico. Permite definir automáticamente una densidad de partículas en cualquier momento de la evolución con el comportamiento asintótico correcto. También hemos demostrado la equivalencia unitaria de todas las cuantizaciones que satisfacen estos criterios. Aunque hemos llevado a cabo la cuantización en un gauge específico, los procedimientos llevados a cabo en diferentes gauges son equivalentes.

Con respecto a las ondas gravitacionales, nuestra actividad se ha centrado principalmente en proyectos definitorios de la ciencia de LISA. Por un lado, hemos publicado el “manifiesto” del Fundamental Physics Working Group, donde hemos establecido nuestra visión de qué señales de física más allá de la relatividad general buscar con este experimento, qué modelos y teorías privilegiar en dicha búsqueda y qué características explorar más en detalle: relaciones de dispersión modificadas, violaciones del principio de equivalencia y de las simetrías fundamentales, modelos de energía oscura, de materia oscura y de agujeros negros, entre otras. En el curso del año hemos estado preparando también el Artículo Blanco del Cosmology Working Group, todavía en fase de escritura. Estamos coordinando la sección del fondo estocásticos de ondas gravitacionales, dentro de las tareas requeridas para los miembros plenos del Consorcio, categoría en la que hemos pasado en 2020.

Relacionado con estos temas, pero desarrollado fuera del Consorcio, señalamos un artículo sobre el fondo estocástico de ondas gravitacionales en gravedad cuántica, proyecto que ha requerido varios meses de desarrollo. Hemos explorado por primera vez la producción de un fondo estocástico en un catálogo de numerosos modelos cosmológicos procedentes de teorías de gravedad cuántica y establecido qué modelos pueden producir un espectro azul en las frecuencias de los interferómetros actuales y futuros. La cosmología de gas de cuerdas, el nuevo escenario ekpyrótico, la inflación no-conmutativa de Brandenberger y Ho y los espaciotiempos multi-escala pueden producir una señal detectable por DECIGO, y en el caso del

nuevo escenario ekpyrótico, también por el Einstein Telescope, misión en que el IEM tiene una participación. Sin embargo, ninguno de ellos llega a la curva de sensibilidad de LISA o de la red LIGO-Virgo-KAGRA. Contrariamente a lo esperado en la literatura, la gravedad cuántica no-local, una de las principales teorías bajo el foco investigador del grupo, no produce un fondo estocástico de ondas gravitacionales detectable. Es debido al hecho de que a altas frecuencias el espectro tiende al predicho por el modelo de inflación de Starobinsky, cuya amplitud está muy por debajo de las curvas de sensibilidad de los experimentos. Estos y otros resultados han sido resumidos en el capítulo de un manual de Astronomía de Ondas Gravitacionales de tres volúmenes que será publicado por Springer en 2021.

El hito principal alcanzado respecto al estudio de teorías multi-escala ha sido la verificación de la posibilidad de generar una aceleración cósmica tardía en una de las cuatro teorías desarrolladas por el grupo a partir de 2010. En esta teoría, la energía oscura se interpreta como un fenómeno derivado de una expansión no-estándar guiada ni por un campo escalar ni por efectos de curvatura, sino por la estructura multi-fractal de la geometría del espaciotiempo, realizada por un cálculo integro-diferencial específico para sistemas multi-escala y fractales. Esta explicación resulta natural en el sentido de que no hay ajustes finos en los parámetros de la teoría.

Por último, subrayamos nuestra participación en la coordinación y escritura del Volumen 9 del Libro Blanco del CSIC, publicado por la Editorial CSIC en una colaboración a nivel nacional con todos los grupos principales de física teórica, astrofísica y cosmología del Consejo. En particular, hemos contribuido a la redacción del capítulo 4 “Origin and Fate of the Universe” sobre inflación, bariogénesis, materia oscura, energía oscura y ondas gravitacionales, y a la coordinación y redacción del capítulo 7 “Gravity” sobre modelos de gravedad cuántica y de altas energías aplicados a la cosmología y a fenómenos gravitatorios en general.

Algunos de los temas de investigación de nuestro grupo en física gravitacional hacen uso de técnicas matemáticas en las que la combinatoria y la teoría de números juegan un papel esencial. Por ejemplo, los estudios realizados por algunos miembros del grupo sobre el espectro del operador de área se basan en el uso de la teoría analítica de números. En el curso de estas investigaciones ha sido necesario obtener y caracterizar algunas nuevas identidades para los números de Bernoulli. En primer lugar, conjeturamos estas identidades tras identificarlas con la ayuda de programas de cálculo simbólica y la OEIS (enciclopedia en línea de secuencias enteras) y luego las demostramos (Comptes Rendus. Mathématique, 357 (2020) 1, 41-44). De manera similar, hemos aplicado nuestros conocimientos sobre métodos asintóticos en teoría analítica de números (que adquirimos en el curso del trabajo sobre la entropía del agujero negro que llevamos a cabo hace algunos años) al estudio del comportamiento asintótico de los polinomios de Appell reescalados (familia que incluye a los polinomios de Bernoulli, Euler, Hermite y Laguerre). Dada una sucesión de polinomios  $p_n$ , a menudo es interesante localizar sus ceros y, después de reescalar el argumento de una manera apropiada, determinar las curvas límite (atractores) a las que se acercan cuando  $n$  tiende a infinito. Además, es importante averiguar el comportamiento asintótico de estos polinomios en este límite (ver Advances in Applied Mathematics 113 (2020) 101962). Estas ideas juegan un papel relevante en el estudio mediante métodos de mecánica estadística de las transiciones de fase en sistemas termodinámicos.

Durante el año hemos continuado con nuestro trabajo sobre la descripción hamiltoniana de los sistemas gravitatorios, en particular hemos puesto a punto un enfoque novedoso (que se basa en el algoritmo de Gotay, Nester, Hinds y otros métodos que hacen uso directo de las ecuaciones de campo) y los aplicamos al estudio de la acción de Holst, a partir de la cual puede obtenerse la formulación de Ashtekar real para la relatividad general. En 2021 aparecerán varios artículos sobre este tema, algunos de ellos completados durante 2020 (ver arXiv: 2011.00661 [gr-qc]). El resultado más importante a este respecto es la identificación de una descripción hamiltoniana muy simple, totalmente invariante de Lorentz, para la relatividad general a partir de la cual es posible obtener la formulación habitual de Ashtekar.

## FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

### Capturas electrónicas en núcleos superpesados

Hemos continuado con el estudio general de la desintegración beta en el núcleo, estudiando vidas medias de captura electrónica en núcleos superpesados. Existen predicciones teóricas de regiones de especial estabilidad en núcleos muy pesados que están relacionadas con cierres de capas o subcapas para determinado número de protones o neutrones, aunque estas predicciones resultan ser muy dependientes de las interacciones utilizadas. La producción de núcleos superpesados se realiza principalmente mediante reacciones de fusión y existen diferentes estrategias experimentales que permiten sintetizar elementos de hasta  $Z=112$  en las denominadas reacciones de fusión fría. Para alcanzar elementos aún mas pesados se hacen necesarias reacciones de fusión caliente en las que se utilizan blancos y proyectiles más asimétricos consiguiendo producir los elementos  $Z=112-118$ . Los núcleos así producidos sufren principalmente una cadena de desintegraciones alfa para finalizar en una fisión nuclear. La identificación de esas cadenas de desintegración alfa asociadas lleva a poder establecer el núcleo original que se ha producido en la reacción. En este contexto es de especial importancia saber si los productos intermedios de desintegración presentan canales de desintegración beta+ o captura electrónica con vidas medias comparables a la desintegración alfa porque de ser este el caso abriría la posibilidad a nuevas ramas de desintegración que conduzcan por

un lado a elementos superpesados mas ricos en neutrones cercanos a las islas de estabilidad predichas y por otro lado a abrir la posibilidad de identificar nuevos elementos que no pertenecen a las cadenas originales de desintegración alfa.

El estudio teórico de la desintegración beta y captura electrónica de núcleos superpesados se había realizado hasta la fecha únicamente mediante modelos fenomenológicos de escasa verosimilitud. En nuestro trabajo realizamos por primera vez cálculos microscópicos de estas vidas medias con fuerzas efectivas nucleón-nucleón tratadas mediante métodos autoconsistentes de Hartree-Fock deformado y correlaciones de apareamiento. Mediante este formalismo se estudiaron una serie de elementos trans-Fermio que incluyen isótopos de Md, No, Lr, Rf, Db, Sg, Bh, Hs y Mt que se producen en la frontera de las reacciones de fusión caliente y fría. Los resultados indican que, en general, las desintegraciones alfa son órdenes de magnitud más rápidas que las correspondientes desintegraciones beta y por tanto los análisis en términos únicamente de cadenas de desintegración alfa son válidos en primera instancia. No obstante, se han identificado algunos isótopos en los que las vidas medias de desintegración alfa y beta resultan comparables. Esto abre la posibilidad de que existan nuevas rutas hacia las islas de estabilidad.

### **Núcleos como sistemas de tres cuerpos con interacciones de campo medio**

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

### **Confinamiento de sistemas de dos y tres partículas**

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

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

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

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

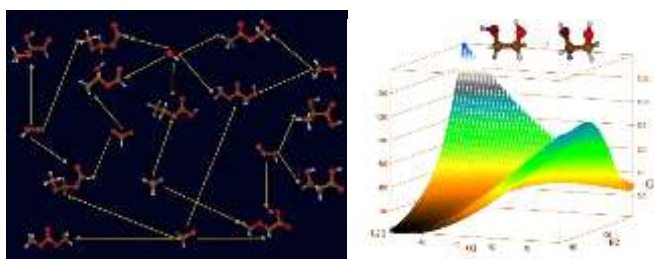
Durante 2020, se ha puesto en marcha el proyecto H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 “*Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)*”. Este proyecto se coordina desde el instituto de Estructura de la Materia y desde el grupo de Química Teórica del Departamento de Química y Física Teóricas en colaboración con la Unidad Asociada con la Universidad de Huelva.



ATMOS designa una red internacional para una Acción Marie Curie de Investigación e Innovación (RISE). El objetivo principal es establecer una red de colaboración para el estudio de problemas científicos relacionados con los elementos de contaminación atmosférica, con énfasis en la formación de estudiantes graduados en ciencias atmosféricas. La red está compuesta por once grupos científicos y 31 científicos senior.

ATMOS se centra en especies abundantes ( $O_3$ , HCHO,  $HO_2$ ,  $NH_3$ ,...), especies orgánicas volátiles oxigenadas (OVOC's) y radicales que no se están caracterizado completamente previamente. Básicamente, el trabajo científico de los participantes del IEM se refiere a la identificación y reactividad de los radicales orgánicos y de los OVOC's que presentan rotación interna. La comprensión de los procesos que involucran compuestos orgánicos en la atmósfera depende de su identificación y caracterización. El modelado espectroscópico cuantitativo línea por línea en el rango infrarrojo (IR) es necesario para las observaciones atmosféricas actuales y futuras con instrumentos de gran escala. Por lo tanto, para entender los efectos en la atmósfera, se necesitan parámetros estructurales y espectroscópicos de tales especies moleculares. Estos estudios requieren un gran esfuerzo científico centrado en la caracterización de especies conocidas y nuevas y en el conocimiento de la evolución química de las fuentes de fase gaseosa, de los procesos fotoquímicos inducidos y los ciclos radicales. En el IEM, la herramienta principal para la caracterización molecular son los cálculos ab initio altamente correlacionados, así como los códigos Originales de Fortran para la determinación de propiedades espectroscópicas.

Un ejemplo importante es el metanol que se ha identificado con instrumentos a gran escala gracias a un intenso trabajo de laboratorio espectroscópico. En la región IR, muchos espectros de moléculas con rotores internos todavía requieren un modelado teórico completo que debe incluir el acoplamiento vibración-rotación-torsional para proporcionar listas de líneas confiables para los estudios atmosféricos. Este es el caso de las moléculas que han sido previamente estudiadas, pero sin un modelado completo y preciso de todas sus bandas de rotación de vibración. Una complicación adicional para el modelado surge a energías más altas, ya que los de estados vibracionales excitados pueden interactuar con niveles torsionales excitados. Por otra parte, la densidad de los niveles de torsión afecta a los espectros milimétrico, submilimétrico o infrarrojo lejano.



Otro objetivo de ATMOS es la reactividad. Los contaminantes orgánicos atmosféricos pueden actuar como precursores de las reacciones químicas que pueden producir radicales libres. El estudio de los ciclos radicales atmosféricos presenta desafíos importantes, ya que los ciclos radicales no se entienden bien. Los estudios sistemáticos de los gases orgánicos precursores y sus propiedades son vitales. Aunque muchos procesos involucran sólo a los estados electrónicos fundamentales, algunos procesos radicales de formación y disociación implican excitación electrónica en los rayos UV y regiones visibles, la identificación de los estados electrónicos disociativos y de Rydberg requiere colaboración entre los experimentos y la teoría.

Las herramientas para la reactividad son cálculos ab initio altamente correlacionados, teoría funcional de densidad y códigos Fortran para la determinación de las tasas cinéticas.

Durante 2020, el código original ENEDIM se ha modificado para poder tratar sistemas con tres o más movimientos de gran amplitud que interactúan. Las nuevas subrutinas se han aplicado al estudio de la molécula astrofísica de etilenglicol y sus variedades deuteradas. Un gran esfuerzo se ha dedicado a la espectroscopia y a la formación de la acetona mediante procesos sin barreras. Esta especie, que es un contaminante importante es también una molécula astrofísica y se puede formar a partir de los radicales  $\text{CH}_3\text{CO}$  y  $\text{CH}_3\text{COCH}_2$  que se han caracterizado espectroscópicamente. Además, se ha realizado un trabajo muy extenso sobre los isómeros  $\text{C}_3\text{O}_3\text{H}_6$ . Para estas especies se han identificado 29 procesos de formación sin barreras a partir de radicales.

Algunos de los VOC's y radicales estudiados son también moléculas astrofísicas no rígidas relevantes detectadas en fuentes de fase gaseosa del medio interestelar. Su estudio espectroscópico es el objeto de nuestros proyectos FIS2016-76418-P y COOPB20364.

## **TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA**

### **Espintrónica con semimetales topológicos**

Los materiales topológicos han atraído muchísimo interés en la última década ya que presentan nuevos fenómenos fundamentales al mismo tiempo que grandes promesas para nuevas aplicaciones tecnológicas. Los sistemas topológicos sin brecha de energía entre la banda de valencia y de conducción forman la familia de semimetales topológicos, donde las dos bandas se tocan en un conjunto de puntos de medida nula en la zona de Brillouin. Los semimetales topológicos de Weyl y Dirac son fases de la materia tridimensionales donde estos puntos aislados están protegidos por la topología y la simetría. En la proximidad de estos puntos la relación de dispersión se comporta como un análogo tridimensional del grafeno y se puede describir como una versión anisotrópica de la ecuación de Dirac o de la ecuación de Weyl. Las cuasipartículas de baja energía se comportan como fermiones relativistas. Una de las manifestaciones más importantes de las propiedades topológicas es la presencia de estados de superficie en regiones compactas del espacio de momentos. Por esta razón, los estados de superficie de estos materiales se denominan arcos de Fermi. Hemos estudiado el efecto del acoplamiento espín-órbita de Rashba en los arcos de Fermi de los semimetales topológicos. El acoplamiento de Rashba se induce debido a la rotura de la simetría de inversión en la superficie. Este acoplamiento se puede incrementar por la interacción con un sustrato y se puede controlar mediante un campo eléctrico externo. Estudiamos analíticamente y numéricamente la rotación de espín de los estados de superficie como función del momento de los electrones y la intensidad del acoplamiento. Además, hemos realizado un análisis detallado de la conductancia en un montaje con dos terminales. Dependiendo de la intensidad de los términos cuadráticos en el Hamiltoniano, la conductancia con inversión del espín puede ser dominante, mostrando el potencial de estos materiales para aplicaciones en espintrónica.

### **Ergodicidad, caos y localización en cadenas cuánticas de espín con desorden**

Una de las excepciones más llamativas al comportamiento térmico en sistemas cuánticos de muchas partículas es la transición a la localización de muchos cuerpos (MBL). Esta fase MBL es una fase cuántica aislante que emerge en ciertos sistemas desordenados con fuerte interacción cuando el desorden es suficientemente intenso, como en la paradigmática cadena unidimensional de espín.

Hemos estudiado el lado ergódico de la transición a la localización de muchos cuerpos en su modelo estándar, la cadena de espín de Heisenberg desordenada. Hemos mostrado que la energía de Thouless, extraída de la estadística espectral de largo rango y el espectro de potencias de las fluctuaciones de la distribución completa de momento no es suficientemente grande para garantizar la termalización. Ambas formas de estimar la energía de Thouless coinciden y se comportan de manera no monótona con el desorden, presentando un pico intenso para valores intermedios del desorden. Además, hemos mostrado que las condiciones iniciales que no termalizan aparecen en la fase ergódica con mucha más probabilidad de lo esperada. Hemos propuesto un mecanismo para la transición a la fase localizada, controlado por la energía de Thouless y la presencia de eventos anómalos.

### **Modelos integrables para sistemas cuánticos disipativos**

Los modelos integrables de Richardson-Gaudin (RG) se remontan a los trabajos originales de Richardson para la solución exacta del modelo BCS de superconductividad durante los años sesenta y a la derivación del magneto cuántico integrable publicado por Gaudin en los años setenta. Ambas soluciones exactas se recuperaron más tarde en el contexto de granos superconductores ultrapequeños a partir del año 2000 y se combinaron para dar a luz a familias de modelos exactamente solubles basados en las álgebras  $\text{SU}(2)$ . Estas familias de modelos con solución exacta se aplicaron ampliamente a sistemas mesoscópicos cerrados en diferentes áreas de la física cuántica de muchos cuerpos, como la física nuclear, la materia

condensada, los átomos fríos, la óptica cuántica y la química cuántica. A pesar de que la mayoría de las aplicaciones se centraron en el estudio de los hamiltonianos hermiticos, los modelos RG pueden incorporar la no hermiticidad mediante el uso de coeficientes complejos para la combinación lineal de sus integrales de movimiento, o incluso integrales de movimiento con parámetros internos complejos. La no hermiticidad tiene un área de aplicación muy amplia en la física cuántica de muchos cuerpos. En particular, es una característica distintiva de la dinámica de los sistemas cuánticos disipativos. La matriz de densidad dependiente del tiempo de los sistemas cuánticos débilmente acoplados a un entorno markoviano se rige por la ecuación maestra de Lindblad. Esta ecuación maestra define el Liouvilliano como un superoperador no hermitico que actúa sobre el espacio de matrices densidad. Hay muy pocos ejemplos de Liouvillians no triviales que se resuelvan exactamente. En este trabajo obtuvimos la solución exacta de un sistema de átomos de  $N$  niveles débilmente acoplados a un medio de alta temperatura. Haciendo uso, por primera vez, de la familia trigonométrica  $SU(N)$  de modelos RG, pudimos derivar Liouvillians exactamente solubles que describen la dinámica de sistemas abiertos de átomos de múltiples niveles. Como ejemplo más simple, mostramos que el modelo de espín colectivo disipativo, cuya solución exacta ya se conocía, se puede derivar del modelo RG trigonométrico  $SU(2)$ . Luego pasamos al siguiente grado de complejidad y estudiamos en profundidad el modelo RG  $SU(3)$  que describe sistemas disipativos de átomos de 3 niveles. Trabajamos en detalle la combinación particular de integrales de movimiento trigonométricas  $SU(3)$  que dan lugar al Liuviliano deseado, como así también la forma matemática correspondiente de sus autovalores que dependen de dos conjuntos de parámetros espectrales que a su vez son fijados por las soluciones de un conjunto de ecuaciones no-lineales acopladas. A pesar de la complejidad de las ecuaciones de RG  $SU(3)$  trigonométricas, pudimos resolverlas exactamente y estudiar las propiedades de las soluciones para el estado estacionario y para varios estados con decaimiento lento en sistemas con una gran cantidad de átomos. Estas soluciones exactas se interpretaron en términos de un problema electrostático bidimensional en equilibrio para la posición de los parámetros espectrales en el plano complejo. Esperamos que estos nuevos modelos exactamente solubles de sistemas de átomos disipativos de  $N$  niveles amplíen la comprensión de la dinámica de los sistemas cuánticos abiertos y también puedan servir como comprobación de las diversas aproximaciones al problema de muchos cuerpos en sistemas cuánticos abiertos.

### **Ruptura dinámica de simetría en bicapas de grafeno giradas**

Dentro del comportamiento llamativo de las bicapas de grafeno giradas, una de las cuestiones más relevantes tiene que ver con el origen de las fases fuertemente correlacionadas que se observan en el así llamado ángulo mágico de giro. Estas fases se caracterizan por tener comportamiento aislante con un factor de llenado entero del sistema electrónico, y han atraído mucha atención por ser consideradas como un precursor de las fases superconductoras adyacentes.

Desde esa perspectiva, hemos estudiado las fases con ruptura de simetría que pueden aparecer en las bicapas giradas en el ángulo mágico, como consecuencia de la fuerte interacción electrón-electrón. Con tal propósito, hemos diseñado un esquema de cálculo de Hartree-Fock autoconsistente en espacio real, tomando como punto de partida un modelo de enlace fuerte de las bicapas de grafeno giradas y añadiendo el potencial de interacción a través de la autoenergía del electrón. De esa forma hemos podido discernir los efectos de las interacciones de Hubbard y de Coulomb de larga distancia, que dan lugar en general a tendencias antagónicas en el diagrama de fases. Desde un punto de vista técnico, este esquema de cálculo conduce a la resolución de un conjunto de ecuaciones autoconsistentes, puesto que la autoenergía se construye a partir de los propios autoestados de energía que uno pretende encontrar. El cálculo ha requerido la diagonalización de matrices de gran dimensión, como consecuencia del gran número de átomos ( $\sim 10.000$ ) de la celda unidad de las bicapas giradas. En la práctica, hemos conseguido llevar a cabo una aproximación recursiva al propagador del electrón, con la que se puede alcanzar buena convergencia construyendo en cada paso la autoenergía con los autovectores obtenidos en la iteración anterior.

Hemos analizado las diferentes fases que pueden surgir de una ruptura dinámica de simetría en el punto de neutralidad de carga, y que pueden explicar la brecha de energía observada experimentalmente en el espectro electrónico en el ángulo mágico. Cuando la interacción de Coulomb está apantallada por electrodos metálicos, hemos visto que la brecha de energía se abre entre las bandas de valencia y de conducción de más baja energía por efecto de la ruptura de la simetría quiral en el régimen de acoplo fuerte. Cuando se aumenta sin embargo el apantallamiento dieléctrico, hemos encontrado un acoplo crítico en el que la ruptura de la simetría quiral se ve suprimida, mientras que se dispara una señal muy fuerte de ruptura de la simetría de inversión temporal con la aparición de una masa de Haldane. Por otra parte, cuando la interacción de Coulomb de larga distancia no está apantallada, hemos visto el desarrollo de un patrón dominante adicional para acoplo fuerte, caracterizado por la ruptura de la simetría de inversión temporal, pero con circulaciones opuestas en las dos subredes de las láminas de carbono, con la consiguiente ruptura de la simetría de valle. En este caso se abre también una brecha de energía entre los conos de Dirac, pero superpuesta al desdoblamiento de la degeneración de las bandas de baja energía en los puntos  $K$  de la zona de Brillouin del moaré.

Nuestra investigación ha puesto en evidencia que las bicapas de grafeno giradas son un sistema complejo donde la conjunción de diferentes grados de libertad (dos valles, dos capas) conduce a varias posibilidades de condensación que caracterizan la ruptura de simetría. La imagen resultante es que varias transiciones tienen lugar entre las diferentes fases cuando uno modifica la intensidad de la interacción de Coulomb. Esta favorece principalmente la ruptura de la simetría quiral y de inversión temporal, cuyos parámetros de orden tienden a competir a lo largo del diagrama de fases y se convierten en dominantes de manera alternativa en diferentes regímenes de la intensidad de la interacción.

## 2A.2. DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL en la instalación ISOLDE.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativísticas en el experimento R3B@GSI.
- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Espectroscopia Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.



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

## LABOR INVESTIGADORA:

### DISPERSIÓN ELÁSTICA A ENERGÍAS EN TORNO A LA BARRERA DE COULOMB CON BLANCOS DE $^{208}\text{Pb}$ : LOS CASOS DE $^{15}\text{C}$ Y $^{17}\text{Ne}$ .

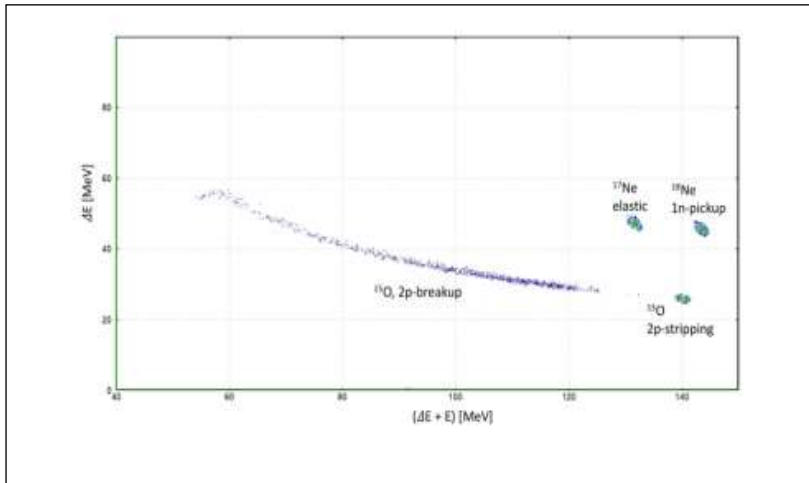
(J. D. Ovejas, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge et al.)

A pesar de tener una energía de separación bastante grande para el último neutrón de valencia ( $S_n=1218$  keV), la característica onda s casi pura de la función de onda de estado fundamental del  $^{15}\text{C}$  parece dar un comportamiento de halo en diferentes reacciones. Esta estructura de halo también se ha sugerido a partir de estudios de alta energía, donde se ha visto una gran sección eficaz de interacción total y distribuciones con un pico pronunciado (tanto longitudinales como transversales) de los fragmentos después de la ruptura en  $^{14}\text{C}+n$ .

A finales de 2017, con dos de los nuevos criomódulos instalados en el linac de HIE-ISOLDE (CERN, Suiza), podríamos estudiar la dispersión casi de barrera de  $^{15}\text{C}$  por vez primera (IS619). El objetivo del experimento es medir la distribución angular de la dispersión elástica de  $^{15}\text{C}$  a 4.37 MeV/u de energía de haz contra un blanco de  $^{208}\text{Pb}$ , verificando de esta manera si el halo se manifiesta con un fuerte patrón de absorción, como ocurre con otros núcleos de halo, tales como  $^6\text{He}$ ,  $^{11}\text{Li}$ , y  $^{11}\text{Be}$ . Además, para estudiar la competición con otros canales de reacciones como la ruptura o la transferencia de un neutrón al blanco de  $^{208}\text{Pb}$ .

Se utilizó GLORIA [NIM A755(2014)69-77] un conjunto de telescopios de silicio para detectar las partículas cargadas dispersas, lo que permitió la separación de los diferentes componentes del haz y posibles fragmentos de reacción. Se desarrolló una simulación de Monte Carlo, utilizando la herramienta Geant4 [NIM A506 (2003)250-303], de la configuración del detector con el fin de verificar los datos experimentales adquiridos, que fueron analizados utilizando el paquete ROOT [<https://root.cern/>] del CERN. Durante la simulación, el grosor de los detectores DE se optimizó para mejorar la resolución en energía. Se prestó especial atención al efecto de canalización del haz contaminante ( $^{15}\text{N}$ , 50 veces más abundante), que cubre en parte la región de dispersión de  $^{15}\text{C}$ . El canal cuasi-elástico fue identificado e integrado, permitiendo determinar un comportamiento clásico de dispersión elástica de hasta  $60^\circ$ , como predicen los cálculos teóricos del CDCC.

En la continuación del experimento de  $^{15}\text{C}$ , realizamos en febrero de 2020 otro experimento (E788S) en SPIRAL-GANIL (Caen, Francia), el estudio de la dispersión cercana a la barrera de  $^{17}\text{Ne}$  a 8 MeV/u también en un blanco de  $^{208}\text{Pb}$  [5]. Se utilizó la misma configuración de detectores y los procedimientos de análisis y simulación fueron análogos al caso de  $^{15}\text{C}$ . El núcleo  $^{17}\text{Ne}$  es un caso más claro de estructura borromea, interpretado como un núcleo compacto de  $^{15}\text{O}$  más dos protones débilmente ligados ( $S_{2p}=933$  keV) que, también muestra una gran sección eficaz de reacción total y distribuciones estrechas de los fragmentos de  $^{15}\text{O}$  después de la ruptura. Esta vez, la pureza del haz (sin contaminantes presentes), su buena intensidad, el pequeño grosor del blanco (que se traduce directamente en una mejor resolución) y el ángulo de emisión más pequeño, permitió un resultado claro y concluyente para el canal elástico. La mayor separación en masa (de  $A=17$  a  $A=15$ ) en la ruptura, debido a la configuración borromea, también permitió una diferenciación más fácil del canal de ruptura. Este trabajo constituye la tesis doctoral de Javier Díaz Ovejas, que se defenderá en la primavera de 2021.



**Fig 1.** Simulación de Monte Carlo de un pixel delantero ( $30^\circ$ ) del detector para los canales esperados en la reacción  $^{17}\text{Ne}+^{208}\text{Pb}$  a  $8\text{ MeV/u}$ .

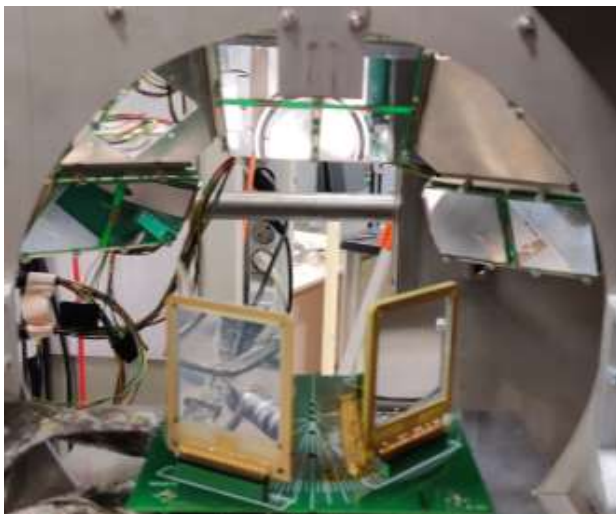
### EXPERIMENTO P01047: POBLACIÓN DE ESTADOS $\alpha$ NO LIGADOS EN $^{16}\text{O}$ VIA $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$ EN CMAM, MADRID.

(J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V.G. Távora)

La reacción  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$  tiene gran importancia para la Astrofísica Nuclear debido a su relevancia tanto a la hora de determinar la proporción de carbono que se transforma en oxígeno, como en la nucleosíntesis de los elementos más allá de  $A=16$ . En los últimos 60 años se han producido muchos avances en el su estudio, sin embargo, la incertidumbre de la sección eficaz de reacción sigue siendo demasiado elevada.

Debido a que en la región energética de interés no existe un estado de paridad natural que sirva como resonancia para la captura radiativa directa de  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ , la sección eficaz total se determina mediante la suma de las colas de resonancia y capturas directas de los estados fundamental y excitados de  $^{16}\text{O}$ . Con lo que utilizamos la reacción nuclear inversa  $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$  para poblar y determinar las anchuras de los estados no ligados emisores de  $\alpha$  de  $^{16}\text{O}$ .

El experimento sobre la reacción  $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$  se llevó a cabo en el Centro de Micro-Análisis de Materiales (CMAM) de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) (España). Utilizamos un haz de protones de energía  $2.6\text{ MeV}$  que interaccionaba con un blanco de  $120\ \mu\text{g}/\text{cm}^2$  de  $\text{MgF}_2$  (en un soporte de  $^{12}\text{C}$  de  $10\ \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ). Se utilizó un sistema de detectores de silicio segmentados (DSSD) para poder medir el ángulo y la energía de las partículas salientes. El montaje experimental cubrió un gran rango angular lo que permite la detección de partículas emitidas en  $180^\circ$  en coincidencia. Así, el objetivo principal del análisis es identificar dos partículas a junto con (idealmente) el  $^{12}\text{C}$  de retroceso en coincidencia. Son de especial interés las partículas  $\alpha$  que pueblan los estados  $2+$  y  $1-$  de  $^{16}\text{O}$ , localizados a  $6917\text{ KeV}$  y  $7116\text{ KeV}$  respectivamente y que son considerados como fundamentales en los procesos de captura radiativa. El análisis de datos está realizándose en la actualidad.



*Figura X.* Foto del sistema de detectores y sus posiciones en dentro de la cámara de vacío. En la parte inferior se pueden ver los detectores de Silicio segmentados (DSSD) y en la parte superior los detectores de Silicio pertenecientes a la estructura conocida como Silicon Ball.

## DeepHyp - TÉCNICAS DE DEEP LEARNING PARA EL ESTUDIO DE HIPERNÚCLEOS EXÓTICOS (Project 2019-T1/TIC-13194 TALENTO Comunidad de Madrid, C. Rappold, S. Escrig Lopez)

Dentro de la colaboración WASA@FRS, el próximo experimento S447 de espectroscopía hipernuclear está programado para marzo de 2022 en las instalaciones de GSI-FAIR, Alemania. En 2019, la parte central del detector WASA se transportó a GSI-FAIR. En el experimento S447, el sistema de detección central de WASA se combinará con el separador de fragmentos (FRS) de GSI. Los fragmentos emitidos hacia adelante desde la desintegración hipernuclear serán medidos por la segunda mitad del FRS (S2-S4) con una excelente resolución de momento. Entretanto, los detectores WASA medirán las partículas ligeras de las desintegraciones de los hipernúcleos. El experimento S447 ha sido aprobado por segunda vez durante el Comité Asesor del Programa General de GSI-FAIR durante la reunión de septiembre de 2020. El proyecto DeepHyp se concentra principalmente en la preparación del experimento S447 y posteriormente en el análisis de los datos experimentales obtenidos. El desarrollo de nuevas técnicas de análisis basadas en técnicas de deep-learning tiene como finalidad de mejorar la espectroscopia hipernuclear. El objetivo principal es abordar el rompecabezas actual de la vida útil del hipertrítón y la confirmación de la observación del estado ligado  $nn\Lambda$ . La preparación del experimento ha sido una parte principal del plan del proyecto DeepHyp de 2020. Se llevó a cabo la finalización de los simulaciones más realista Geant4 del aparato experimental. Se estimaron eficiencias de seguimiento de las partículas y la reconstrucción de eventos. La óptica iónica de S2-S4 fue optimizada por aceptación de los fragmentos alta con un poder de resolución esperado de 5200. Estamos desarrollando algoritmos de deep-learning para el procedimiento de búsqueda de trayectorias utilizando redes neuronales gráficas. Hemos también iniciado la I + D de un prototipo de un detector de micro vértice de silicio para la estimación del vértice de interacción de las colisiones nucleares.

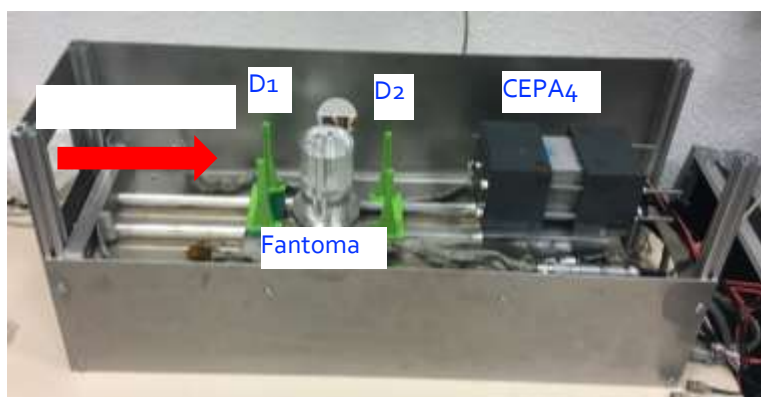
Este trabajo forma parte de la Tesis doctoral de **Samuel Escrig López**.

## Proyecto PRONTO-CM -B2017/BMD-3888 Comunidad de Madrid y ENSAR2-PASPAG- (J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V. Távora)

Este proyecto está motivado por la reciente llegada a España de la técnica de tratamiento de protonterapia. Dos nuevos centros empezaron a operar desde finales de 2019 (Quirónsalud) y en el transcurso del año 2020 (Clínica Universitaria de Navarra). El objetivo de nuestras actividades es diseñar un prototipo de escáner de protones empleando la técnica de Tomografía computerizada con protones (proton-CT). Esto permitiría aumentar la precisión de los planes de tratamiento en protonterapia y un mayor control de la dosis al reducir incertidumbres en el rango de protones al estar empleando la esta misma partícula tanto para la planificación como para el tratamiento.

En el transcurso del año 2019 hicimos un experimento inicial para probar el concepto del prototipo en el acelerador tándem de la instalación CMAM en la Universidad Autónoma de Madrid. En él, empleamos un haz de protones de 10 MeV (el máximo posible en la instalación) y detectores únicamente de silicio para realizar imágenes radiográficas de fantomas sencillos y de un espesor máximo de 1 mm. Tras el éxito de dicha medida, presentamos la propuesta para dos experimentos en dos instalaciones internacionales de haces de protones: AGOR-KVI cyclotron en Groningen (Países Bajos) y Cyclotron Centre Bronowice en Cracovia (Polonia). Ambos fueron aprobados por el interés suscitado por nuestro prototipo pero debido a problemas técnicos en la primera instalación y, principalmente, a las restricciones ocasionadas por la crisis sanitaria internacional del COVID-19, ambos experimentos se pospusieron para ser realizados en 2021.

El grupo continuó trabajando en la preparación y optimización del dispositivo experimental mediante simulaciones Monte Carlo para construir un prototipo que a finales del año 2020 lucía como se muestra en la figura inferior.



*Prototipo de escáner pCT construido en el marco del proyecto PRONTO-CM. Se muestra la cámara experimental en cuyo interior se encuentran, según la dirección del haz de protones indicado, el soporte para el detector de silicio D1 (verde), el fantoma a examinar, el soporte para el detector de silicio D2 (verde también) y, por último, el detector CEPA4 que será alcanzado por los protones para ser frenados completamente al final.*

### **IS633: CAPTURA ELECTRÓNICA DEL $^8\text{B}$ A LOS ESTADOS EXCITADOS DE ALTA ENERGÍA DEL $^8\text{Be}$ CARACTERIZACIÓN DE LA FUNCIÓN RESPUESTA DE LOS DETECTORES USADOS EN EL EXPERIMENTO IS633**

(Silvia Viñals i Onses, Olof Tengblad, M.J.G. Borge, E. Nácher, J.A. Briz)

La desintegración beta+/EC del  $^8\text{B}$  es uno de los pasos en el proceso de combustión de hidrógeno que tiene lugar en el Sol y, además, es la principal fuente de neutrinos solares de alta energía, por encima de 2 MeV. Además de su interés astrofísico, la desintegración beta del  $^8\text{B}$  da acceso a la estructura nuclear del  $^8\text{Be}$ . Éste tiene un continuo de estados  $2+$  debido a una amplia resonancia a 3 MeV. Los dos estados a 16.6 y 16.9 MeV forman un doblete  $2+$ , siendo el único caso en el que uno puede esperar más que un pequeño porcentaje de mezcla de isospín  $T=0$  y  $T=1$ . El  $^8\text{Be}$  presenta una estructura de clúster alfa-alfa que hace que sus estados excitados resonantes se rompan en dos partículas alfa. Desde la perspectiva de su estructura nuclear, el núcleo  $^8\text{B}$  es el único núcleo conocido cuya configuración de halo de protón en su estado fundamental está bien establecida. Se espera que la desintegración beta al estado de 17.6 MeV se vea incrementada por esta estructura.

Realizamos un experimento en 2016 en ISOLDE (CERN) con el objetivo de determinar la intensidad beta para las desintegraciones a los estados excitados del  $^8\text{Be}$ . De particular interés es el doblete  $2+$  a 16.6 y 16.9 MeV. El segundo objetivo es determinar la razón de ramificación (BR) de la emisión de protones retardada poblada por EC, que no había sido observada hasta ahora. Dicho canal de desintegración se espera que ocurra a través del estado de 17.6 MeV y la estimación de su BR está basada en la estructura de halo del  $^8\text{B}$ . Además, se ha determinado de forma más precisa la vida media del núcleo  $^8\text{B}$ . Para alcanzar estos resultados, hemos caracterizado de forma precisa los detectores usados en el experimento con Geant4 y se ha implementado un código de desconvolución para obtener la población beta del  $^8\text{B}$  en  $^8\text{Be}$ .

El montaje experimental consistió en una configuración en forma de “diamante” de cuatro telescopios de detectores de Si. Los telescopios estaban compuestos por un detector fino doblemente segmentado (DSSD) con 16 bandas a cada lado. Detrás, un detector de Si más grueso. Se utilizaron dos espesores diferentes para el detector frontal de los telescopios; dos DSSD más gruesos de 60 micras para asegurar la detección completa de las alfas más y dos de 40 micras que se optimizaron para tener una respuesta precisa frente partículas beta.

A partir de la detección de las alfas, se obtiene y corrige el espectro de coincidencia alfa-alfa para diferentes efectos experimentales utilizando Geant4. Los DSSDs se han caracterizado y, a partir de este trabajo, se ha obtenido la función de respuesta de cada detector, siendo crucial para el análisis posterior de Matriz R y el procedimiento de desconvolución. Para el desarrollo del código de desconvolución se ha realizado un estudio sistemático verificando la bondad de la solución obtenida tanto para simulaciones como datos experimentales (EPJA-2021 <https://rdcu.be/ceVWw>).

Para el estudio de la desintegración de protones retardados, se realizó un análisis de anti-coincidencia para determinar una cota experimental superior del BR. Se ha realizado una simulación de la desintegración beta del  $^8\text{B}$  y una vez validada, se ha simulado la emisión de un pico de protones para determinar el límite en el cual sería visible sobre el fondo experimental.

Resumiendo, los resultados obtenidos y defendidos en la presentación de la tesis doctoral de Silvia Viñals i Onses el 11.12.2020 son:

- Reducción de la incertidumbre en el valor de la vida media un factor 3.1 respecto el último valor publicado.
- Los parámetros de mezcla de isospin se han determinado usando un análisis de Matriz R, confirmando el cálculo de modelo de capas que establecía una completa mezcla de isospín.
- Se ha implementado el algoritmo de Richardson-Lucy en C++. Ha sido probado en distribuciones simuladas y ha demostrado ser significativo para obtener la composición de una fuente alfa.
- Del espectro de población beta, se ha obtenido la distribución de intensidad beta y se ha determinado que el valor de  $B(\text{GT})$  es 0.8(2)
- Se ha determinado una cota superior experimental para el BR para la emisión de beta-p de  $2.5 \times 10^{-6}$  (99.9%).

### **LA ESTRUCTURA NUCLEAR DE NÚCLEOS SUPERPESADOS**

(FPA2017-84756-C4-2-P, Andrea Jungclaus, J. Luis Egido)

Motivado por el progreso experimental reciente, presentamos el primer estudio triaxial más allá del campo medio de núcleos pares-pares superpesados (J.L. Egido y A. Jungclaus, Phys. Rev. Lett. 125, 192504). Los cálculos para los isótopos pares del Flerovio hacia el supuesto cierre de capa de neutrones  $N=184$  se realizaron utilizando la interacción de Gogny. Éstos incluyen la restauración de las simetrías de número de partículas y momento angular y la mezcla de diferentes formas utilizando el método generador de coordenadas. La importancia del grado de libertad  $\gamma$  se destaca al comparar los cálculos triaxiales con aquellos con simetría axial realizados dentro del mismo marco teórico. Para los tres isótopos pares del Flerovio entre el  $^{288}\text{Fl}$  prolado y el  $^{296}\text{Fl}$  oblado, se predicen formas triaxiales del estado fundamental, mientras que los cálculos con simetría axial sugieren una transición marcada de la forma prolada-oblada entre  $^{290}\text{Fl}$  y  $^{292}\text{Fl}$ . Se prevé que en  $^{290}\text{Fl}$  se produzca un nuevo

tipo de coexistencia de formas, a saber, la que se produce entre dos formas triaxiales diferentes. Finalmente, se confirma la existencia de un cierre de capa de neutrones en  $N=184$ , mientras que no se encuentra evidencia de que  $Z=114$  sea un número mágico de protones. Un segundo manuscrito, que presenta predicciones para los esquemas de excitación de los miembros de las cadenas de desintegración alfa experimentalmente accesibles de  $^{294}\text{Og}$  y  $^{292}\text{Lv}$ , ya se ha enviado para su publicación.

### **EXPERIMENTO NP1712-RIBF145R1: ESPECTROSCOPIA GAMMA DEL NÚCLEO CON $T_z=-2$ $^{56}\text{Zn}$** (FPA2017-84756-C4-2-P, estudiante de doctorado Álvaro Fernández, Andrea Jungclauss)

Los estados excitados en  $^{56}\text{Zn}$  se poblaron en la reacción de knockout de un neutrón de un haz de  $^{57}\text{Zn}$  incidiendo en un blanco de Be a energías relativistas en un experimento realizado en la Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF) en RIKEN. Se observaron tres rayos gamma que se asignaron para formar la secuencia yrast  $6^+ \rightarrow 4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$ , convirtiendo así  $^{56}\text{Zn}$  en el núcleo  $T_z=-2$  más pesado en el que se conocen estados excitados. Las diferencias de energía de excitación entre estos niveles y los estados análogos isobáricos en el núcleo espejo  $T_z=+2$ ,  $^{56}\text{Fe}$ , se comparan con cálculos a gran escala realizados en el marco del modelo de capas considerando el espacio de valencia pf completo y diversas contribuciones de ruptura de isospin. Esta comparación, junto con un análisis de las diferencias de energía en el par con  $A=58$ ,  $T_z=\pm 1$   $^{58}\text{Zn}/^{58}\text{Ni}$ , proporciona información valiosa con respecto a la magnitud de los términos de ruptura de isospin radial y nuclear en la región por encima de  $^{56}\text{Ni}$ . Los resultados de este trabajo se están preparando actualmente para su publicación.

Desde 2017 el grupo desarrolla un proyecto en colaboración con la Dra. María Pilar de Lara-Castells (CSIC-IFF) y sus colaboradores centrado en el estudio multiescala desde primeros principios de sistemas y procesos de interés en nanociencia. Es una continuación natural de líneas de investigación realizadas en el grupo en los últimos años. A este respecto, las investigaciones del grupo tienen relevancia en áreas sociales como la energía, catálisis, los nuevos materiales y la industria de la ciencia, con un énfasis en la reducción del impacto medioambiental. Actualmente dos serían las temáticas generales en los que se enmarca nuestra investigación tal y como se expone a continuación:

### **COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS**

En 2020 en colaboración con el grupo de la Dr. Lenor Chico hemos mostrado teóricamente como nanotubos de carbono de diámetros y quiralidades adecuados presentan, en su estado aplastado, una serie de propiedades en su estructura electrónica que son características de las recientemente descubiertas bicapas de grafeno desalienadas (twisted bilayer graphene) que sorprendentemente muestran superconductividad.

También hemos estudiado la difusión y los cambios estructurales inducidos térmicamente en nanopartículas con núcleo de hierro, cobalto y níquel dentro de varias capas de oro.

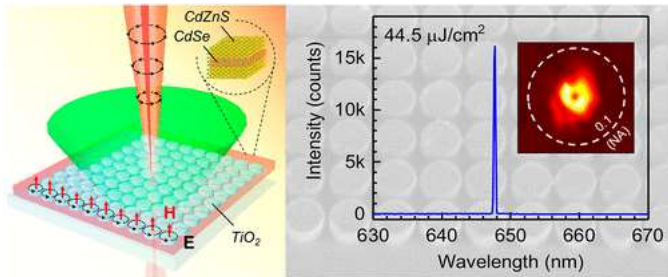
### **FENOMENOLOGÍA VITREA EN CRISTALES CON MÍNIMO GRADO DE DESORDEN**

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.). Durante 2020 hemos estudiado y analizado mediante espectroscopia dieléctrica y modelado teórico la transición vítrea orientacional en el cristal plástico orientacional 2-adamantanona.

### **PROPIEDADES ÓPTICAS DE METASUPERFICIES: ESTADOS LIGADOS EN EL CONTINUO**

Hemos continuado nuestro trabajo sobre redes periódicas planas (metasuperficies) de estructuras resonantes dieléctricas y plasmónicas sub-longitud de onda con especial énfasis en estados ligados en el continuo (BICs en inglés). Los BICs han atraído mucho interés últimamente en Fotónica por su factor Q infinito (teóricamente). Estos estados son modos con pérdidas que en un cierto límite de algún espacio de parámetros no pueden acoplarse a ningún canal de radiación. Para atrapar la luz en tales modos electromagnéticos de ancho de línea casi cero, es habitual explotar las propiedades ópticas de metasuperficies: los canales especulares salientes se pueden suprimir ajustando los parámetros del sistema de varias maneras, lo que conduce a BIC protegidos por simetría. En este sentido, sobre la base de una teoría generalizada de dipolos eléctricos/magnéticos acoplados para redes planas infinitas, se ha investigado una variedad de escenarios en los que meta-átomos simples o dobles se pueden describir mediante una combinación de varios dipolos eléctricos (ED) y/o magnéticos (MD). Nuestro trabajo teórico se ha desarrollado en colaboración con el Donostia International Physics Center, apoyado por el proyecto LENSBEAM de Excelencia MICIU. Además, hemos demostrado que:

- configuraciones simples de metasuperficies de cilindros/discos de Si con resonancias MD pueden dar lugar a BICs robustos y protegidos por simetría, corroborado experimentalmente por los grupos de Sunhuke Murai (*Kyoto University*) y Jaime Gómez Rivas (*Surface Photonics, Technical University of Eindhoven*).
- en colaboración con Arseniy Kuznetsov y Ramón Paniagua (*Institute of Materials Research and Engineering, IMRE, Singapur*) se ha conseguido un láser a temperatura ambiente, usando como "cavidad sin espejos" un de esos estados ligados en el continuo en una metasuperficie plana de nanodiscos de  $\text{TiO}_2$ , on nanoplacas coloidales como medio con ganancia (ver figura adjunta).
- se puede conseguir transparencia electromagnética extremadamente estrecha inducida por estados ligados en el continuo en metasuperficies de discos de alto índice, por interferencia destructiva de dichos estados con resonancias MD (perpendiculares entre sí) muy radiativas, demostrado experimentalmente en el dominio de GHz por el grupo de Jean-Michel Geffrin (*Institut Fresnel, Marsella*) y Fernando Moreno (Universidad de Cantabria).



## PROPIEDADES ÓPTICAS FUNDAMENTALES DE PARTÍCULAS DIELECTRICAS

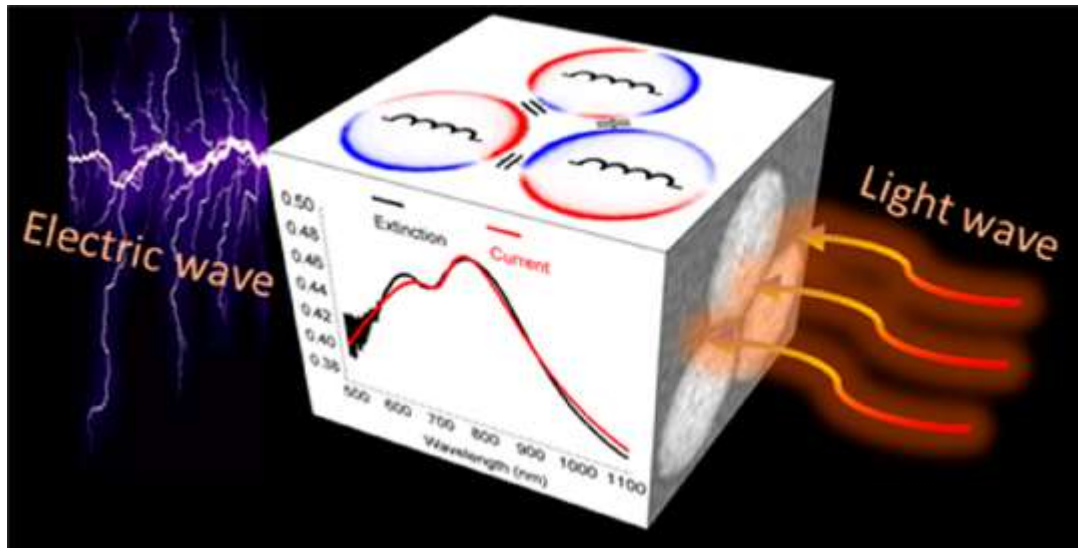
En colaboración con el grupo de Juan J. Sáenz, Donostia International Physics Center, hemos investigado las propiedades fundamentales de dispersión de partículas dieléctricas (Mie) cuya respuesta óptica puede ser explicada por dipolos dieléctricos y magnéticos (a pesar de ser no magnéticas). En particular, se han abordado analíticamente tres propiedades fundamentales:

- Primera condición de Kerker, a saber, la ausencia de luz de retrodispersión: hemos demostrado que las pérdidas o la ganancia óptica inhiben la primera condición de Kerker para esferas homogéneas independientemente del tamaño de la partícula, la longitud de onda incidente, la polarización entrante y el orden multipolar. De ello se deduce que las esferas con absorción, como las esferas dieléctricas de Mie en el rango espectral visible, y las partículas plasmónicas, como las esferas metálicas, no pueden presentar la primera condición de Kerker.
- Segunda condición de Kerker, a saber, la cuasi-ausencia de luz dispersa hacia adelante: mostramos que la segunda condición de Kerker generalizada es claramente insuficiente para dar lugar a la dispersión óptica hacia adelante casi nula, en contraste con la visión actual del problema. De hecho, conduce a un patrón de radiación de energía que abarca todos los diagramas de dispersión óptica posibles dependiendo de la sección transversal de dispersión total. Curiosamente, demostramos que la optimización de la intensidad hacia atrás, cerca de las resonancias dipolares eléctricas y magnéticas, conduce al resultado contradictorio de un patrón de radiación de energía de campo lejano con una retrodispersión casi nula.

Regímenes de dispersión dipolar: hemos demostrado que la helicidad de un haz de luz entrante no se conserva cuando varios multipolos contribuyen a la dispersión. Esto inhibe el vínculo habitual entre la restauración de la dualidad y la condición de retrodispersión óptica cero. Además, hemos demostrado que la conservación de la helicidad en la dispersión por esferas de Mie dieléctricas de alto índice de refracción se puede utilizar como una prueba de regiones espectrales multipolares puras, particularmente de naturaleza dipolar, más allá de su presunto intervalo espectral de validez.

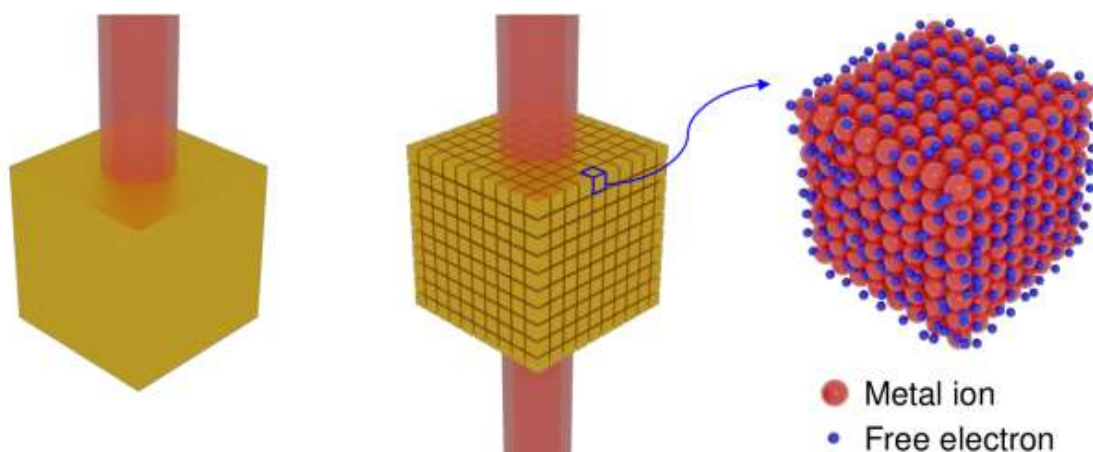
## NANOFOTÓNICA TOPOLÓGICA

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



### METAMATERIALES METÁLICOS EXTREMADAMENTE TRANSPARENTES

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



**Figura 1** Concepto de metamaterial metálico. *a)* Metal sólido, muy opaco. *b)* Metales extraordinariamente transparentes (metamateriales metálicos compactos). Cada partícula está compuesta por átomos metálicos masivos. Los electrones solo se mueven libremente dentro de los confines de las partículas metálicas. En este sentido, estas las partículas pueden considerarse como las "meta-moléculas" o "átomos" de manera similar a los átomos o moléculas en dieléctricos tradicionales.

## **NANOFABRICACIÓN**

La nanofabricación de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas ha sido uno de los principales objetivos de nuestro grupo durante 2020. La interacción de luz de una longitud de onda apropiada con nanopartículas (NPs) conduce a una alta intensificación del campo eléctrico local, que es el principio fundamental en el que se basa la detección molecular mediante Raman y fluorescencia intensificada por nanoestructuras. En los últimos años hemos desarrollado diversos métodos de síntesis de nanopartículas con interesantes aplicaciones en espectroscopía y catálisis. El principal objetivo de esta tarea ha sido el de la fabricación de nanosistemas con propiedades morfológicas específicas conducentes a altas intensificaciones del campo electromagnético. Las estrategias seguidas a tal fin han sido dobles: a) la preparación de nanopartículas con formas anisotrópicas como nanoestrellas y nanovarillas, así como nanoestrellas huecas, y b) la sociación de estas nanopartículas mediante el uso de moléculas bifuncionales capaces de crear espacios interpartícula, en donde el campo se intensifica aún más dando lugar a *hot spots* o puntos calientes. Durante el último año, hemos enfocado nuestra atención en el empleo de diversos ensambladores con el fin de atraer de manera selectiva pesticidas orgánicos persistentes (POPs).

## **FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES Y DISEÑO DE NANOSENSORES**

La funcionalización de superficies metálicas obtenidas por autoensamblaje de moléculas orgánicas fue una línea de trabajo fundamental en nuestro grupo durante 2020. La funcionalización puede incrementar en gran medida la sensibilidad y selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando como resultado superficies de alto rendimiento al combinar las propiedades físicas del metal con las propiedades químicas de moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellas. Además, estas moléculas pueden incrementar la biocompatibilidad de las NP de metal plasmónico, lo que es un tema de gran interés en aplicaciones médicas, y puede permitir el control del autoensamblaje de estos sistemas. En este sentido, se emplearon experimentos de funcionalización derivados de calixarenos para mejorar la capacidad de detección de estos sistemas. Estos ensambladores poseen una cavidad interna dentro de la cual se pueden alojar moléculas difíciles de detectar por SERS. Durante 2020 se probó una nueva generación de calixarenos basada en el uso de moléculas de calixareno con diferentes estructuras dirigidas a la detección de contaminantes emergentes como el dioxano y el glifosato. Estos estudios se realizaron en el marco de la cooperación que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad PJ Safarik de Kosice (Eslovaquia).

## **INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/SUPERFICIE METÁLICA**

La interacción de moléculas biológicas con nanopartículas metálicas de Ag y Au se estudió en profundidad durante el último año. Este estudio también estuvo dirigido en parte a realizar la funcionalización de NP con biomoléculas para conferir mayor biocompatibilidad y selectividad a las aplicaciones analíticas de estos sistemas. Para cumplir con este objetivo, se realizó un estudio de interacción de péptidos con papel importante en el desarrollo de enfermedades neurodegenerativas como los  $\beta$ -amiloides. Dentro de esta línea de investigación, también hemos iniciado una nueva colaboración con investigadores del Hospital Ramón y Cajal en cuanto a la detección de importantes marcadores biológicos tumorales a partir del análisis de exosomas expulsados por células. Se demostró que estos exosomas contienen muchas biomoléculas que pueden usarse en la caracterización de procesos celulares específicos que conducen a patologías diversas.

## **TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DEL PATRIMONIO CULTURAL**

La aplicación de SERS en el estudio del Patrimonio Cultural se centró en la detección de colorantes de difícil estudio por la técnica Raman normal. Otra importante línea de investigación fue la fabricación in situ de NP de plata sobre fibras naturales de lana mediante irradiación láser. Este trabajo se llevó a cabo en colaboración con la Universidad de Bolonia, durante las estancias de varios estudiantes de máster en nuestro departamento. El empleo de este tipo de sustratos metálicos es muy importante para el análisis in situ de pigmentos y tintes artísticos.

La espectroscopia de fluorescencia Raman y de Rayos X también se empleó en el análisis y caracterización de tintas ferrogálicas presentes en manuscritos antiguos con el fin de realizar una discriminación de los diferentes tipos de tintas empleadas en un mismo documento o documentos similares, en donde diferentes tintas empleadas por varias personas pueden ser analizadas. Los principales objetivos de este trabajo fueron: a) discriminación de tintas ferrogálicas en manuscritos escritos en la misma época mediante el uso de espectroscopía Raman y XRF; b) identificación y asignación de los marcadores espectrales Raman de escrituras similares y su correspondencia con la estructura química de los componentes; c) valoración del efecto del envejecimiento sobre las señales espectrales con el fin de encontrar marcadores espectrales temporales, que puedan contribuir a conocer la antigüedad aproximada de las escrituras y las posibles modificaciones posteriores que se realicen en los manuscritos a lo largo del tiempo.

Asimismo, se ha comenzado el estudio, por espectroscopía Raman, de los materiales utilizados en el retablo del Cristo de Forfoleda, Salamanca. Tres muestras de diferentes partes del Cristo fueron proporcionadas por el restaurador Carlos Ávila. Las estratigrafías de las muestras se llevaron a cabo en colaboración con la Dra. Ruth Chércoles de la Facultad de Bellas Artes de la Universidad Complutense de Madrid. En primer lugar, se obtuvieron las imágenes de las estratigrafías con un



microscopio óptico, tanto con luz visible como ultravioleta. Los espectros Raman de las muestras se registraron con un espectrómetro Raman acoplado a un microscopio óptico, empleando una longitud de onda de excitación de 633 nm.

Durante el año 2020 se ha trabajado en la aplicación de técnicas espectroscópicas al estudio y caracterización de diferentes tipos de materiales aplicados a síntesis, restauración y conservación del Patrimonio Cultural tanto antiguo como moderno. Así en colaboración con el IETCC se trabaja en la síntesis de ecocementos con aplicación en impresoras 3D utilizando residuos de construcción y demolición (RCD) y a través de RMN se han determinado las modificaciones microestructurales de dichos cementos. Se colabora con el proyecto europeo Innoconcrete en el estudio que el efecto de aditivos de nueva generación tiene en la microestructura de los materiales de restauración de las construcciones modernas. Con respecto al estudio de los materiales antiguos de restauración, y en colaboración con la Universidad PUCMM de la República Dominicana se han estudiado mediante espectroscopía Raman in situ, los pigmentos originales utilizados en una de las capillas de la Catedral Primada de Santo Domingo, estableciéndose que dichos pigmentos procedían probablemente de materiales autóctonos.

## 2A.3. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

### SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Hielos astrofísicos.
- Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico.
- Generación, procesado y modelado de análogos de polvo interestelar.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.
- Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, silicatos, oxalatos y fases secundarias del combustible nuclear gastado.
- Control cuántico de alineamiento y orientación en moléculas aisladas y gases dipolares ultrafríos.

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y baja presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Generación de plasmas fríos con descargas de radiofrecuencia en gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía de emisión de plasmas en las regiones visible y milimétrica.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga eléctrica.
- Espectroscopía Raman lineal y no lineal (estimulada).
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

### LABOR INVESTIGADORA:

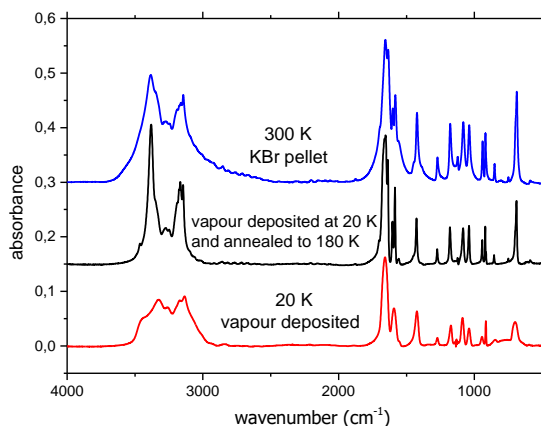
#### FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

##### Hielos astrofísicos

Se han determinado los coeficientes de difusión de moléculas de CH<sub>4</sub> en hielos de agua amorfa a temperaturas entre 42 y 60 K. La combinación de experimentos realizados en el IEM, basados en espectroscopía infrarroja, con experimentos realizados en la Esc. Politéc. Alcoy (grupo del Prof. M. A. Satorre, proyecto coordinado MINECO), basados en detección de pérdida de masa mediante una balanza de cristal de cuarzo criogénica, nos han permitido estudiar hielos de distintas morfologías, y el efecto que tiene esta propiedad en el proceso de difusión. En colaboración con Stephanie Cazaux (T.U. Delft) se han comparado los coeficientes de difusión a escala macroscópica experimentalmente, con simulaciones de Monte Carlo que describen la difusión de estos sistemas a escala microscópica. Este trabajo ha sido publicado en *Astronomy and Astrophysics*.

Siguiendo con hielos de metano y agua, se ha simulado el espectro infrarrojo de capas de hielo de agua amorfa con moléculas de CH<sub>4</sub> adsorbidas, utilizando el paquete de cálculo CASTEP de Materials Studio. Los cálculos reproducen exitosamente la observación experimental de que los modos de vibración de estiramiento OH libres, presentes en la superficie de hielo de agua amorfa (dangling bonds), se desplazan hacia números de onda menores y se intensifican debido a su interacción con moléculas de CH<sub>4</sub>. Este trabajo se ha realizado en colaboración con R. Escribano y M. A. Satorre y se ha enviado a publicar a la revista *Physical Chemistry Chemical Physics*.

Por otro lado, se ha completado en colaboración con los investigadores del Centro de Astrobiología INTA-CSIC, el estudio de 2-aminooxazole en entornos astrofísicos. Se ha predicho que esta especie intervenga en el proceso de formación de RNA, y su detección en el medio interestelar aportaría importantes pistas sobre la química prebiótica. Se han obtenido espectros infrarrojos a baja temperatura de 2-aminooxazole, así como secciones eficaces de destrucción tanto por radiación UV como por rayos cósmicos. Este trabajo ha sido aceptado para su publicación en *The Astrophysical Journal*, donde aparecerá publicado a comienzos de 2021.



IR spectra of 2-aminooxazole vapour deposited at 20K (red) and annealed to 180 K (black) in comparison with the IR spectrum of a 2-aminooxazole KBr pellet (blue).

### Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, y en colaboración con el ICMM del CSIC se ha podido demostrar la naturaleza alifática de análogos de nanopartículas formadas en regiones circumstelares de estrellas evolucionadas, así como la transformación posterior en material aromático por calentamiento, mediante estudios experimentales realizados en la instalación de ultra-alto vacío Stardust. Las medidas de emisión óptica en los plasmas generados por pulverización catódica (sputtering) sobre blanco de grafito en mezclas de Ar con trazas de H<sub>2</sub> han permitido identificar los radicales involucrados en las primeras etapas de formación de dichas nanopartículas. Experimentos análogos introduciendo traas de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> en lugar de H<sub>2</sub> han permitido esclarecer la química en fase gaseosa del acetileno en presencia de C y C<sub>2</sub> que tiene lugar en las capas más externas de estrellas AGB ricas en carbono. Estos trabajos han sido publicados en *Nature Astronomy* y *The Astrophysical Journal*, como se indica en la sección de publicaciones. También se han concluido los estudios del efecto del H<sub>2</sub> en plasmas generados mediante pulverización catódica sobre blanco de Si, y aceptados en 2020 para su publicación.

### Generación, procesado y modelado de análogos de polvo interestelar

Mediante espectrometría de masas de iones y neutros en plasmas fríos generados en descargas RF capacitivas con mezclas de Ar y C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> se ha profundizado en los procesos iniciales de polimerización durante la formación de partículas de carbono amorfo hidrogenado, con especial énfasis en la evolución temporal de las concentraciones de aniones y cationes, y se ha desarrollado un modelo cinético para su simulación. Los resultados obtenidos se encuentran en proceso de redacción para ser publicados.

### Dinámica de reacciones

Hemos abordado el estudio de efectos estereodinámicos en las resonancias de forma (orbiting) a muy bajas energías de colisión (< 2meV) en la reacción prototípica F+HD(v=0,1; j=0,1). Como resultado relevante hemos encontrado que para moléculas rotacionalmente excitadas (j=1), la reacción a las energías de las resonancias transcurre preferentemente con una orientación del eje internuclear perpendicular a la dirección de la velocidad relativa inicial (i.e. colisiones laterales). Este trabajo se ha realizado en el marco de la Unidad Asociada CSIC-UCM.

### Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico

Se ha continuado el estudio de iones moleculares de interés astrofísico. En colaboración con la Universidad de Colonia (S. Schlemmer, O. Asvany and T. Salomon), se ha completado el estudio del espectro ro-vibracional del complejo He-CH<sup>+</sup>, de interés en el estudio de las colisiones entre ambas especies en entornos astrofísicos. Para ello se ha empleado la técnica de fotodisociación infrarroja, usando como fuente de excitación un oscilador paramétrico óptico. Los iones se confinan en una trampa de radiofrecuencia a ~ 4 K por lo que se han medido las transiciones que se originan en los niveles rotacionales más bajos. La excitación resonante del complejo produce su disociación (la energía de disociación de He-CH<sup>+</sup> es D<sub>0</sub>=243 cm<sup>-1</sup>) y el espectro IR del complejo se observa como una disminución en el número de complejos contenido en la trampa en función de la longitud de onda de excitación. Así mismo se ha obtenido el espectro rovibracional del complejo He<sub>4</sub>-CH<sup>+</sup>. Este es el

complejo del tipo  $\text{He}_n\text{-R}^+$  de mayor índice de coordinación observado con resolución rotacional. Debe destacarse que ambas especies presentan claras estructuras de rotor rígido, asimétrico en el caso de  $\text{He-CH}^+$  (simetría  $C_s$  con forma de T) y simétrico en el caso de  $\text{He}_4\text{-CH}^+$  (simetría  $C_{4v}$  con cuatro He en un plano perpendicular a  $\text{CH}^+$ ), pese a ser especies débilmente ligadas en las que podría esperarse estructuras mucho más flexibles.

## FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Durante 2020 hemos continuado con el estudio cuantitativo de flujos de gases fuera del equilibrio, desde condiciones energéticas. No obstante, la labor investigadora del grupo se ha visto gravemente afectada por la pandemia debida a la COVID-19, primero por el confinamiento domiciliario de tres meses desde mediados de marzo, y posteriormente por las limitaciones de aforo impuestas en la desescalada y la “nueva normalidad”. Dado el carácter principalmente experimental de la actividad del grupo, la limitación de asistencia presencial ha supuesto una dificultad añadida para los experimentos previstos.

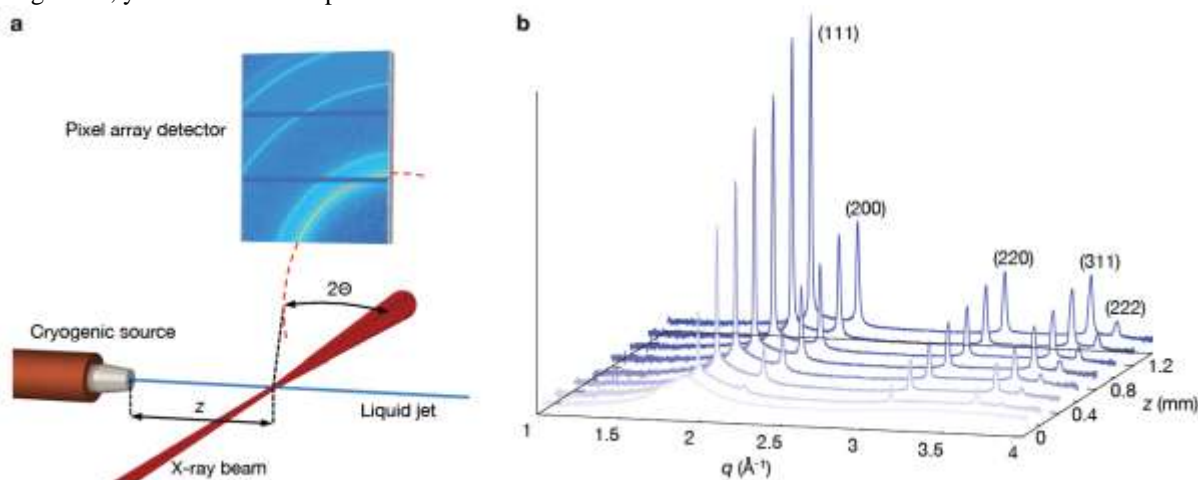
Se ha concluido el análisis de las colisiones inelásticas de  $\text{H}_2\text{:H}_2$  en el intervalo térmico de 20 a 300 K, partiendo de medidas muy precisas de densidades y poblaciones rotacionales en chorros supersónicos de  $\text{H}_2$ , realizadas en nuestro laboratorio mediante espectroscopía Raman, y de coeficientes de transferencia para colisiones inelásticas, calculados teóricamente. Posteriormente, en colaboración con el grupo INTERMOL del IFF-CSIC, se ha extendido el análisis hasta 1000 K, extrapolando los coeficientes colisionales experimentales mediante la ecuación de Arrhenius-Kooij, y comparándolos con nuevos cálculos teóricos que constituyen el estado del arte. Los resultados obtenidos podrán ser de gran utilidad para interpretar las observaciones astronómicas de  $\text{H}_2$  en el infrarrojo.

Se ha continuado con los experimentos de la relajación vibracional de  $\text{CO}_2$ , proceso de gran importancia en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte. Se han realizado medidas de densidades y temperaturas rotacionales y vibracionales en chorros supersónicos de  $\text{CO}_2$  desde toberas entre 400 y 700 K, así como medidas en la onda de choque frontal (disco de Mach) de chorros desde toberas a 800 K y a temperatura ambiente. Del análisis de estas últimas series se ha observado por vez primera el salto de la onda de choque en las poblaciones de los niveles vibracionales excitados.

En cuanto al desarrollo instrumental, se ha rediseñado la tobera de alta temperatura, con nuevos elementos calefactores resistivos que permitirán calentarla hasta 1100 K. Las componentes y piezas necesarias ya están adquiridas y mecanizadas, y se espera poder instalarla y probarla en los primeros meses de 2021.

Por otra parte, tras instalar un sistema de inyección fina regulable, se han realizado más pruebas para producir y estabilizar un menisco de agua que se evapora en baja presión, con la intención de medir mediante espectroscopía Raman el campo de flujo (temperaturas y densidades) resultante. El proceso de evaporación no se conoce con precisión a escala microscópica, siendo especial objeto de debate el salto térmico que se produce en la interfase.

Por último, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (R. Grisenti), y con el departamento de Física Macromolecular del IEM (T. Ezquerro), se ha concluido el análisis de la cristalización de filamentos líquidos subenfriados de mezclas de Ar y Kr. Las medidas de difracción de rayos X se realizaron en el sincrotrón DESY de Hamburgo. De su análisis se ha conseguido interpretar la cinética de cristalización de las mezclas introduciendo explícitamente la desviación de las propiedades termodinámicas respecto de la mezcla ideal, lo que supone un gran avance en la comprensión de la cristalización en general, y la de mezclas en particular.



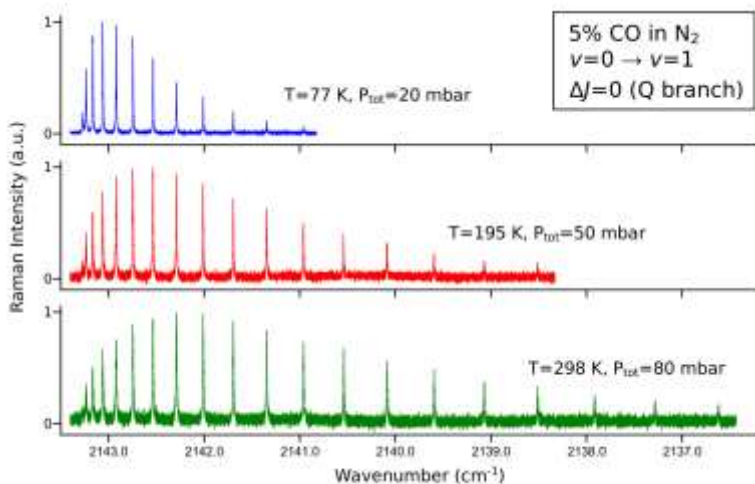
**Figura a:** Esquema de los experimentos de difracción de rayos X en microchorros líquidos  
**Figura b:** Difractogramas de la mezcla Ar(15%)+Kr(85%) a distintas distancias del origen

## ESPECTROSCOPIA LÁSER

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

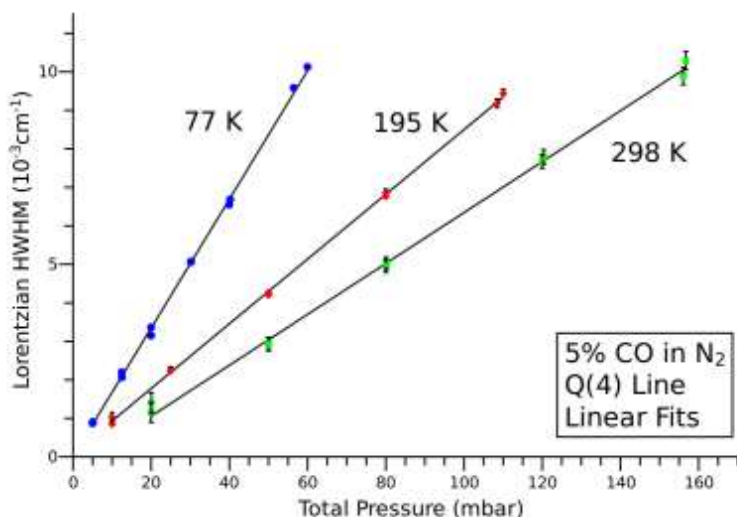
La labor realizada en el Laboratorio de Espectroscopía Láser a lo largo del año 2020 se ha centrado en el estudio experimental, mediante espectroscopía Raman no lineal de alta resolución, de la molécula de CO perturbada colisionalmente por N<sub>2</sub> (en lo sucesivo, el sistema colisional CO-N<sub>2</sub>) para la determinación de sus coeficientes de ensanchamiento por presión.

El sistema CO-N<sub>2</sub> presenta interés desde varios puntos de vista: por una parte, la molécula de CO está presente como producto en múltiples procesos de combustión, especialmente en combustiones incompletas, por lo que puede utilizarse como marcador para la realización de diagnósticos espectroscópicos de estos procesos. Cuando esta combustión ocurre en condiciones atmosféricas (presencia de aire) la molécula de N<sub>2</sub> es el colisionante mayoritario en el medio. Por otra parte, el CO está presente en muy bajas concentraciones en la atmósfera terrestre, y juega un papel en la física y química atmosféricas que aún no se conoce en su totalidad. Su concentración atmosférica presenta fuertes oscilaciones, debidas en parte a su corta vida media (2-3 meses) y a lo disperso y discontinuo de sus fuentes, por lo que existe interés en su monitorización por medios espectroscópicos, tanto desde tierra como desde instrumentos embarcados en satélites. Finalmente, el CO es una de las moléculas más abundantes en el medio interestelar y su presencia se ha detectado en las atmósferas de todos los planetas del sistema solar —excepto Mercurio—, así como en la atmósfera de Titán.



*Figura: Espectros de la rama Q del CO perturbado por N<sub>2</sub> a diferentes temperaturas y presiones*

La monitorización remota de las concentraciones de CO por medios espectroscópicos en cualquiera de estos entornos requiere un conocimiento detallado de su espectro y de los cambios que experimenta en presencia de otras especies que actúen como colisionantes, entre las cuales la molécula de N<sub>2</sub> es con frecuencia la más abundante. En este contexto, es especialmente importante conocer la variación de este espectro con la presión y la temperatura, dos variables que cambian de forma dramática en entornos tales como atmósferas planetarias al cambiar la altitud a la que se realizan las medidas. Experimentalmente, esto se traduce en la necesidad de medir los coeficientes de ensanchamiento colisionales del sistema CO-N<sub>2</sub> a diferentes temperaturas.



**Figura:** Obtención de coeficientes de ensanchamiento para  $Q(4)$  mediante ajuste lineal a 3 temperaturas

La preparación de los experimentos en el sistema CO-N<sub>2</sub> ya se había iniciado en 2019 con la realización de medidas preliminares en CO puro y de difusión en mezclas CO-N<sub>2</sub>. Apoyándonos en estos preparativos, a lo largo de 2020 ha sido posible realizar medidas sistemáticas del sistema colisional a múltiples presiones y tres temperaturas, 77, 195 y 298 K. Las medidas espectroscópicas se han centrado en la rama Q de la vibración fundamental ( $\nu=0 \rightarrow \nu=1$ ) del CO. Del análisis de estas medidas se han obtenido conjuntos detallados de coeficientes de ensanchamiento colisional CO-N<sub>2</sub> a cada una de las temperaturas, particularizados para cada componente rovibracional  $Q(J)$  de la rama Q de la vibración fundamental. La Figura 1 muestra como ejemplo de un registro del espectro de la rama Q del CO a las tres temperaturas de referencia y presiones seleccionadas. La Figura 2 muestra el ajuste de los datos experimentales para la componente rovibracional  $Q(4)$  a las tres temperaturas con objeto de ilustrar la linealidad en la variación con la presión de la anchura colisional de las líneas espectrales y su dependencia con la temperatura.

Los datos extraídos se están comparando con los obtenidos, mediante cálculos cuánticos, por nuestro colaborador F. Thibault (Universidad de Rennes). Una vez finalice este proceso se procederá a su publicación conjunta.

## FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

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

Mediante métodos de primeros principios se ha estudiado una propiedad inusual en oxalatos de Zinc y de Cadmio como es su compresibilidad lineal negativa como así mismo su coeficiente de Poisson lo que es un indicativo de comportamientos inusuales elásticos en algunos oxalatos. Igualmente se pudo caracterizar en la línea de estudio de materiales provenientes del combustible nuclear gastado las propiedades termodinámicas y elásticas de la uranofilita.

## 2A.4. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros, mezclas y 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:

- Nanocompuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Nano y microestructuración de superficies poliméricas.
- Electrónica orgánica.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- 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.
- Sistemas poliméricos reciclables: morfología, estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Microscopía electrónica de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.
- Superficies virucidas.

### 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.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrreología.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecano-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM).
- 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.
- Microscopía de fuerzas atómicas (AFM).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Espectroscopía de absorción de rayos X (NEXAFS).

- Dispersión resonante de rayos X blandos (RSoXS).
- Impresión a chorro de polímeros.

## LABOR INVESTIGADORA:

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

#### NANOESTRUCTURACIÓN DE MATERIALES POLIMÉRICOS

##### **POLÍMEROS CONDUCTORES**

La nanoestructuración sigue siendo una alternativa prometedora para modificar las funcionalidades de los materiales polímeros conductores con el objetivo de buscar aplicaciones en tecnologías que incluyen entre otras células solares orgánicas, transistores de efecto de campo orgánico y diodos emisores de luz orgánicos. Hemos demostrado que mediante técnicas de irradiación con láser se pueden formar estructuras de superficie periódicas inducidas por láser en películas delgadas de poli (3,4-etilendioxitiofeno) complejado con poli (estirenosulfonato) (PEDOT: PSS) depositadas sobre óxido de estaño e indio. La morfología se ha caracterizado por microscopía de fuerza atómica (AFM) y dispersión de rayos X de ángulo pequeño de incidencia rasante (GISAXS). La estructura cristalina de la película polimérica se estudió mediante dispersión de rayos X de ángulo alto e incidencia rasante (GIWAXS) y espectroscopía Raman. Se ha demostrado que las propiedades eléctricas de PEDOT: PSS, evaluadas mediante AFM conductivo (C-AFM), se mantienen tras el proceso de irradiación con láser. Estos resultados pueden ser de interés para lograr nanoestructuras poliméricas conductoras sin necesidad de utilizar condiciones de sala limpia.

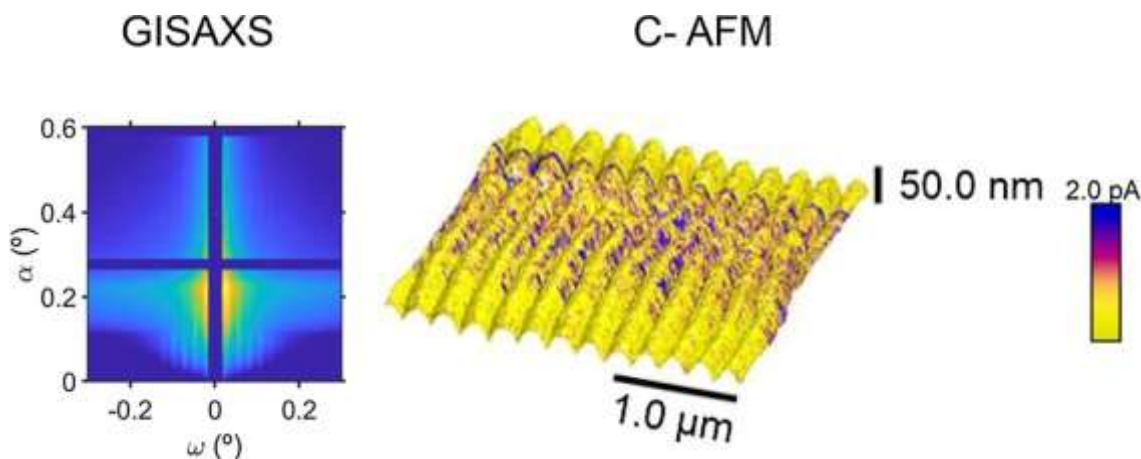


Figura 1. Combinación de experimentos de dispersión de rayos X de ángulo pequeño e incidencia rasante (GISAXS) y de AFM conductivo (C-AFM) han permitido investigar la nanoestructuración mediante técnicas de irradiación con láser del polímero conductor PEDOT:PSS.

##### **COPOLÍMEROS DE BLOQUE**

En colaboración con un grupo del Instituto de Microelectrónica de Barcelona (IMB-CSIC) se ha investigado en detalle los parámetros que gobiernan las cinéticas de autoensamblaje de copolímeros de bloque en condiciones de procesado tanto isotérmicas como no isotérmicas mediante experimentos de dispersión de rayos X de ángulo pequeño de incidencia rasante (GISAXS). Se ha desarrollado una metodología novedosa para el modelado estructural y su evolución con las condiciones térmicas de procesado. Tal modelo permite analizar procesados convencionales en condiciones de recocido isotérmico y se extiende al caso más realista de recocido no isotérmico. Este análisis puede ser crucial para la predicción de las condiciones más eficientes para la formación de nano y microestructuras libres de defectos de interés en nanotecnología y microelectrónica.

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

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



Universidad de Bolonia, hemos continuado investigando poliésteres 100% biodegradables que presentan unas excepcionales propiedades mecánicas y de barrera a gases como O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. En particular, se han sintetizado con éxito cuatro homopolíesteres completamente biobasados de ácido 2,5-furandicarboxílico (2,5-FDCA) de alto peso molecular mediante policondensación en fusión en dos etapas a partir del éster dimetílico de 2,5-FDCA y glicoles de diferentes longitudes (el número de grupos metileno varió de 3 a 6). A partir de experimentos de dispersión de rayos X utilizando radiación sincrotrón, fue posible evidenciar la existencia de una mesofase caracterizada de bajo orden estructural (unidimensional o bidimensional), en todas las muestras en estudio, su fracción estando estrictamente relacionado con la longitud de la subunidad de glicol. Dicha mesofase, junto con la fase amorfa y la fase cristalina eventualmente presente, afecta directamente a las propiedades mecánicas y de barrera siendo destacable que el polímero con mayor fracción de mesofase es el que presenta mejores propiedades de barrera frente a gases.

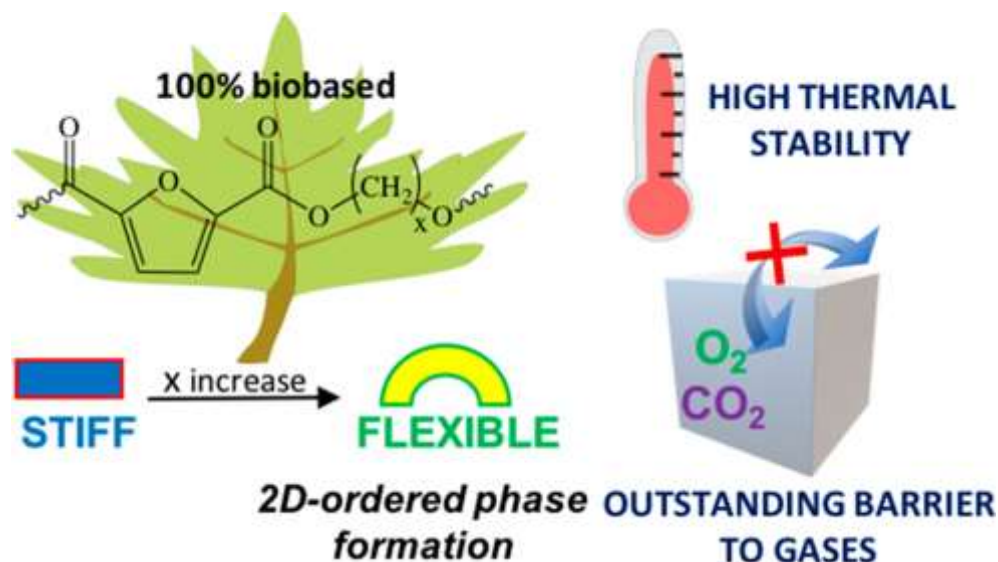


Figura 2. La transición hacia una economía circular obliga la búsqueda de nuevos polímeros 100 % biodegradables con excelente resistencia mecánica y propiedades de barrera frente a gases y cero impacto ambiental.

### BIOCOPOLIMEROS EN BLOQUE BASADOS EN PCL, PTT Y PBF

La disminución de recursos procedentes de combustibles fósiles, el aumento del precio del petróleo, la emisión de gases efecto invernadero en los métodos estándar de producción de plásticos, así como la limitada biodegradabilidad que presentan estos materiales, está impulsando el desarrollo de lo que se conocen como “biopolímeros” o “bioplásticos”. Estos son polímeros derivados de recursos naturales renovables o bien polímeros biodegradables. En este sentido la caprolactona (PCL) un poliéster alifático lineal, merece especial atención. Además de por su carácter biodegradable, este polímero es particularmente interesante por su resistencia al agua y su elevada flexibilidad. Sin embargo, no presenta buenas propiedades térmicas y mecánicas. Por esta razón, con el fin de mejorar sus propiedades y ampliar las posibilidades de su aplicación, se está procediendo a aplicar técnicas de mezclado o copolimerización con otros polímeros. En este sentido se han preparado copolímeros en bloque a base de PCL con politrimetilen tereftalato (PTT), y polibutilen furanoato (PBF), con diferentes composiciones. El PTT, un poliéster aromático, termoplástico y semicristalino, es uno de los polímeros comerciales más importantes, principalmente debido a sus buenas propiedades mecánicas, físicas y térmicas. Por su parte, el PBF es un polímero reciclable, 100% obtenido a partir de recursos naturales y que presenta también interesantes propiedades mecánicas y de barrera. Esta investigación se está llevando a cabo en colaboración con un grupo de la universidad West Pomeranian University of Technology of Szczecin de Polonia.

### SUPERFICIES VIRUCIDAS Y DENDRIMEROS

La situación de emergencia generada por la pandemia asociada al virus SARS-CoV-2 ha puesto de manifiesto la necesidad de contar con medidas de contención como complemento a las medidas cruciales de diagnóstico, tratamiento y curación de la enfermedad. En particular, la mitigación del contagio en los centros sanitarios puede resultar fundamental, tanto en la reciente situación de pandemia y futuras oleadas de la misma, así como para hacer frente a posibles futuros patógenos. Además del perjuicio económico a los sistemas sanitarios, según datos de la OMS, (Organización Mundial de la Salud) las infecciones nosocomiales son responsables de graves problemas de salud pública. Las Unidades de Cuidados Intensivos de los centros hospitalarios, son las zonas más susceptibles a este tipo de infecciones. Aunque en el caso del SARS-CoV-2 sabemos ahora, tras varios meses de pandemia que el contagio se produce prioritariamente por vía aérea, dotar de propiedades biocidas a, por ejemplo, las superficies del mobiliario hospitalario y de los equipos electrónicos de las unidades de cuidados

intensivos como medida de contención ante futuras amenazas infecciosas. En colaboración con grupos del Instituto de Microelectrónica de Barcelona, del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, del Instituto de Química Avanzada de Cataluña, del Instituto de Química Física Rocasolano, de la Universidad Complutense de Madrid y del Instituto Catalá de Nanociencia i Nanotecnología y de la Universidad de Alcalá se han puesto en marcha varias iniciativas de investigación orientada a la fabricación de este tipo de superficies. Relacionado con este aspecto, hemos empezado a trabajar, en colaboración con un grupo de la Universidad de Alcalá, en el conocimiento de la estructura de dendrímeros en disolución mediante scattering de rayos X a bajo ángulo. Los dendrímeros son macromoléculas monodispersas con una forma y tamaño bien definido y superficie molecular multivalente. Estas características les convierten en sistemas muy atractivos desde el punto de vista biomédico. Sus aplicaciones dependen principalmente del tipo de grupo funcional de la superficie del dendrímero. Por ejemplo, cuando los grupos funcionales periféricos son catiónicos, estos sistemas encuentran aplicaciones como dispensadores de fármacos o como antibacterianos. Sin embargo, cuando se trata de dendrímeros con superficies aniónicas, se han probado como antivirales. Los experimentos para determinar su estructura en disolución se han realizado en el sincrotrón ALBA.

## **Grupo de BIOFISICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)**

### **ASPECTOS GENERALES DE LA INVESTIGACIÓN**

Debido a las circunstancias especiales motivadas por la pandemia, la labor investigadora de nuestro grupo ha sufrido importantes cambios respecto a su actividad normal. Especialmente hay que destacar que la disminución del contacto presencial ha debilitado la cohesión de la actividad investigadora del grupo y especialmente la discusión de los resultados científicos. Por supuesto la investigación experimental ha quedado condicionada a los períodos de actividad en los que era posible la presencia en los centros de trabajo en condiciones de seguridad.

Pese a ello se han conseguido obtener resultados experimentales en el proyecto sobre el estudio de tratamientos para el cáncer de mama metastático con anticuerpos monoclonales que se realiza al amparo de un contrato con la Fundación del Hospital Vald'Hebrón y comenzar la actividad experimental y de simulación en el proyecto "*Eco-diseño de envases basados en polímeros convencionales mediante modelización multiescala validada*" concedido por el MCINN a mediados del año.

Nuestro grupo ha querido sumarse a la llamada de la Institución de finales del mes de marzo para contribuir en la medida de las capacidades de los grupos en la lucha contra la pandemia generada por el SARS-CoV-2. Así fue como diseñamos un proyecto de investigación con una metodología exclusivamente computacional y con la particularidad de solicitar la intervención de los ciudadanos a través de la plataforma Boinc gestionada por IBERCIVIS. Nuestros conocimientos previos en el área de proteínas nos facilitaban esta participación en el área de interacciones de fármacos con proteínas. Es así como a finales de marzo se inician una serie de contactos con los responsables técnicos de IBERCIVIS y finalmente se lanza el proyecto "COVID-PHYM" el 24 de abril de 2020, tras la aprobación del mismo por parte de la VICYT.

También hay que destacar la actividad desarrollada en colaboración con investigadores de la UAH y del INTA a partir del 2019 y cuyos resultados han sido parcialmente objeto de publicación en este pasado año.

A continuación, se describen las actividades y resultados principales obtenidos en los diferentes proyectos.

### **PROYECTO COVID-PHYM**

#### ***Breve cronología del proyecto***

Se inician los contactos con los investigadores de IBERCIVIS a finales del mes de marzo y se elabora un proyecto científico por parte de nuestro grupo y que pueda llevarse a cabo con la ayuda de la plataforma BOINC administrada por IBERCIVIS. Hay que hacer constar que ya habíamos tenido colaboraciones previas con IBERCIVIS hace unos años. Después de varias reuniones técnicas, que se reseñan en el apartado correspondiente de esta memoria, el proyecto se lanza finalmente el 24 de abril de 2020 mediante un comunicado de prensa del CSIC (ver detalles en la página web del grupo).

Objetivo científico del proyecto:

#### ***"Estudio "in-silico" de inhibidores de la SARS-CoV-2 ARN polimerasa nsp12"***

Sobre la base de que la estructura 3D de la ARN polimerasa ha sido elucidada recientemente y siendo esta proteína un componente clave para la replicación y transcripción de ARN se conforma como un "target" para el desarrollo de antivirales. Se proponen testear diferentes antivirales ya usados en otras enfermedades tales como el Remdesivir para el ebola, el Favipiravir para la influenza y fiebre amarilla entre otros, el Tenofovir para el VIH y la Emtricitabina para el VIH.

El proyecto científico en resumen abarca los siguientes puntos:

1. Identificación de los centros activos de inhibición en la ARN polimerasa.
2. "Docking" de los ligandos mencionados en el receptor
3. Refinamiento de las interacciones Ligando-Receptor, usando técnicas tales como MD, "Free energy perturbation" y QM/MM.
4. Creación de distintos farmacóforos de los ligandos anteriormente citados y búsqueda en bases de datos tales como ZINC, en búsqueda de potenciales inhibidores basados en las características de los cuatro ligandos.
5. "Docking" de los potenciales inhibidores
6. Refinamiento de las interacciones Ligando-Receptor de los potenciales inhibidores mas prometedores.

A lo largo del año 2020 el proyecto ha dado lugar a los siguientes resultados concretos:

***Acoplamiento de remdesivir y tenofovir al centro activo de la ARN-polimerasa del SARS-CoV-2 incluyendo cadenas de ARN creciente y patrón (análisis de resultados en colaboración con***

El reposicionamiento de remdesivir y tenofovir contra COVID-19 sólo ha demostrado evidencia parcial de mejorar los resultados terapéuticos en ensayos clínicos y estudios observacionales, respectivamente. La razón detrás de esta eficacia sigue siendo desconocida. En este estudio, desarrollamos un enfoque in-silico de acoplamiento molecular (docking) para las formas activas trifosfato de ambos antivirales con la polimerasa SARS-CoV-2 y el complejo de la cadena de ARN, bajo la hipótesis de que la observación clínica podría basarse en las especificidades de la interacción fármaco-proteína. Nuestro modelo ha permitido la reconstrucción precisa de las interacciones moleculares entre el remdesivir y el receptor, que presenta una afinidad ligeramente mayor que el ligando natural ATP. Observamos además un conjunto de características del complejo receptor-tenofovir que sugieren una interacción funcional, pero subóptima, lo que probablemente resulta en una inhibición viral limitada en ausencia de una alta concentración intracelular en los tejidos diana. Nuestros hallazgos proporcionan un argumento para la eficacia mixta de compuestos basados en tenofovir contra SARS-CoV-2 y resalta la relevancia de la disponibilidad intracelular del nucleótido análogo respecto al tropismo viral.

**PROYECTO “ECO-DISEÑO DE ENVASES BASADOS EN POLÍMEROS CONVENCIONALES MEDIANTE MODELIZACIÓN MULTIESCALA VALIDADA”**

El objetivo principal de este proyecto es establecer un protocolo de modelización multiescala que describa las distintas interacciones de los polímeros que generalmente se encuentran en los materiales multicapa. Para ello se propone una integración bottom-up de métodos computacionales que trabajen a diferentes escalas espacio-temporales. Paralelamente, se proponen experimentos específicos para verificar y validar los modelos computacionales.

Se está desarrollando un software específico para calcular los parámetros de interacción de monómeros, basado en el cálculo de energías de la teoría del funcional de la densidad (DFT) al objeto de determinar la afinidad e interacción de los segmentos poliméricos a nivel atómico. Por otro lado, la determinación experimental de la fuerza de la interacción entre las especies poliméricas se está llevando a cabo mediante experimentos de depresión de la temperatura de fusión y espectroscopía infrarroja (FTIR). Se han encontrado notable diferencias en la fuerza de la interacción en las diferentes mezclas binarias exploradas hasta ahora. Estos resultados preliminares nos permitirán seleccionar los materiales más prometedores para futuros estudios sobre morfología, reología y estructura de las mezclas procesadas.

***Simulación por ordenador del efecto de la temperatura en las dimensiones en el fundido de la cadena de polietileno ramificado al azar con cadenas cortas.***

Como parte de este proyecto ha continuado el análisis y comportamiento del PE ramificado, principal componente de las multicapas. En este sentido se han analizado los resultados de las conformaciones de la cadena obtenidos mediante simulaciones de dinámica molecular a diferentes temperaturas en una serie de copolímeros de etileno/1-buteno. Hemos obtenido que la relación invariante  $\langle R_g^2 \rangle / M$  disminuye con el aumento de la concentración de ramas etilo y que  $\kappa$  cambia de valores negativos a positivos a una concentración de ramas. Así pues, se demuestra que existe una fuerte influencia del número de grupos laterales con la diferente población de estados trans/gauche de la cadena principal al variar la temperatura. Este comportamiento no se ha explicado antes ni teóricamente ni por simulación por ordenador. Estos resultados nos ayudarán a determinar qué tipo de PE es el más adecuado como componente de las multicapas.

***Microrreología de polímeros en disolución: implementación de un método válido para determinar las interacciones entre los componentes***

Este aspecto de la investigación es también relevante de cara a establecer una buena metodología que nos ayude a caracterizar de manera precisa las diferentes interacciones entre los polímeros constituyentes de las multicapas.

En ese sentido se ha completado el estudio que se venía realizando de la difusión de nanopartículas de diferente funcionalidad en soluciones acuosas de óxido de polietileno. Los resultados finales muestran la formación de una capa de PEO adsorbida sobre las partículas de poliestireno modificado con carboxilato. Además, esta capa provoca que la difusión sea más lenta que la correspondiente a las partículas no funcionalizadas, en correspondencia con el aumento de tamaño. La interacción entre la superficie de la partícula modificada con carboxilato y las macromoléculas de PEO se ha confirmado mediante simulaciones computacionales a nivel atómico (Figura 3). Los copolímeros de acrilato injertados que funcionalizan la superficie de las nanopartículas, confieren a las mismas una superficie hidrofóbica adecuada para interactuar con el polímero. Las simulaciones sugieren que la interacción está modulada por la naturaleza del monómero acrílico, así como por su longitud.

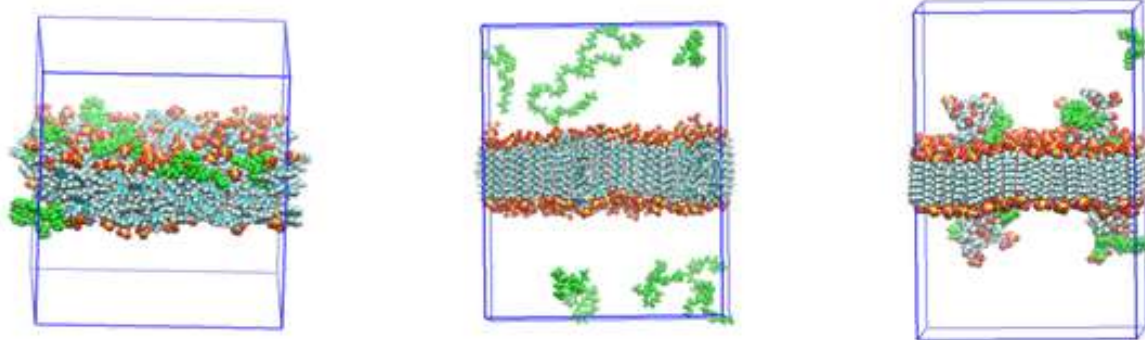


Figura 3. Representación de la caja de simulación para distintos segmentos de nanopartícula, incluida la interacción con moléculas de PEO (después de 400 ns de dinámica NPT).

### PROYECTO SOBRE LA INTERACCIÓN DE HER2-BIOSIMILARES

Los receptores de membrana HER2 intervienen en los procesos de crecimiento, división y reparación de las células mamarias. Sin embargo, en casi el 20% de los cánceres de mama, el gen que expresa la HER2 no funciona correctamente y desarrolla excesivas copias de sí mismo, lo que provoca una sobreexpresión de la proteína HER2. Esto provoca que las células crezcan sin restricciones y de forma descontrolada. En los últimos años se han desarrollado terapias exitosas contra el cáncer de mama basadas en anticuerpos monoclonales (mAb). En concreto el Herceptin y el Pertuzumab se están utilizando en una terapia combinada. Paralelamente las industrias farmacéuticas han venido desarrollando biosimilares del Herceptin. De hecho, los biosimilares son hoy de gran interés, siendo sustancias biológicas con una alta similitud en estructura, actividad biológica y perfil de inmunogenicidad con otro medicamento biológico ya aprobado y que ha de cumplir con los mismos requisitos de calidad, seguridad y eficacia. Sin embargo, los biosimilares pueden presentar una variabilidad, principalmente debido a un proceso de fabricación, mucho más complejo que el de los medicamentos convencionales. La variabilidad puede afectar no solo a las propiedades estructurales y la actividad biológica, sino también a las propiedades biofísicas básicas. Por tanto, la determinación de las propiedades hidrodinámicas como el coeficiente de difusión y el tamaño, junto con las características físicas como el peso molecular y la movilidad electroforética (carga eléctrica), son fundamentales en las formulaciones de mAbs terapéuticos biosimilares.

En nuestro grupo se están explorando las propiedades de diferentes biosimilares, así como su asociación con el dominio extracelular del receptor HER2, en colaboración con el Hospital Val d'Hebron. La determinación de las propiedades hidrodinámicas a diferentes concentraciones ha dado acceso a importantes propiedades como el segundo coeficiente virial ( $B_2$ ), el parámetro de interacción de difusión ( $k_D$ ), el coeficiente de absorción de UV ( $dA/dc$ ) y la carga neta de proteína ( $Z$ ), ligado directamente a la estabilidad y la secuencia de aminoácidos específica de los biosimilares. Utilizando una combinación de técnicas experimentales hidrodinámicas y electroforéticas, y protocolos de simulación multiescala, se intenta también describir el comportamiento estructural y dinámico de los complejos HER2-Biosimilar en solución acuosa en condiciones fisiológicas. El objetivo es establecer las similitudes o diferencias entre los complejos que se pueden obtener entre diferentes biosimilares y la proteína HER2.

### COLABORACIONES CON OTROS GRUPOS DE INVESTIGACIÓN

*Con el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de Universidad de Alcalá de Henares se investigan las propiedades reológicas y morfológicas de determinados polímeros biodegradables*

En esta colaboración investigamos un enfoque interesante que permite la polimerización controlada de los dos grupos funcionales presentes en el metacrilato de glicidilo (GMA) para originar arquitecturas macromoleculares con propiedades novedosas. El GMA es un monómero interesante y muy valioso como precursor de polímeros y copolímeros en aplicaciones avanzadas, entre las que destacan la síntesis de copolímeros biodegradables y el desarrollo de portadores de fármacos, genes (terapéuticos) o agentes de diagnóstico, biosensores y estabilizadores e inmovilizadores de enzimas. El material obtenido muestra propiedades muy sugerentes, como la ausencia total de cristalinidad y un bajo valor de la transición vítrea. Las propiedades reológicas obtenidas en estos materiales sugieren además una ausencia total de enmarañamientos, lo que implica una topología macromolecular especial. Estas y otras propiedades se encuentran en este momento bajo intensa investigación, dadas las implicaciones que se derivan de ellas en cuanto a procesado y posibles aplicaciones.

*Con el Centro de Astrobiología CSIC-INTA colaboramos puntualmente en el estudio reológico de biopelículas extremófilas en Río Tinto*

Se han realizado investigaciones sobre la caracterización de las propiedades reológicas de biopelículas de diferentes microorganismos. Los resultados preliminares apuntan hacia una relación característica entre la microestructura observada por LTSEM y las propiedades reológicas. El comportamiento más llamativo se refiere al observado en microorganismos extremadamente móviles. Estos sistemas muestran un comportamiento dilatante bajo cizalla muy característico que probablemente ayude a preservar la entidad estructural de las biopelículas bajo tensiones externas.

***Con el departamento de Microbiología de la Universidad de Granada sobre Exploración del mecanismo de acción del péptido antimicrobiano AS-48***

Hemos propuesto un mecanismo de acción antimicrobiano para la bacteriocina circular AS-48, basada en observaciones experimentales y simulaciones de dinámica molecular a detalle atómico. La información obtenida de esas simulaciones apoya un mecanismo basado en la tensión superficial continua ejercida por la bacteriocina sobre la membrana citoplasmática bacteriana. Esa tensión superficial permite la formación de defectos en la membrana que, en última instancia, conduce a la formación de poros y fugas en la membrana. Además, gracias al detalle atómico dado por las simulaciones, fue posible asignar el papel de los diferentes tipos de aminoácidos de la bacteriocina en el proceso de destrucción de la membrana.

***Chapter 2B***

***RESEARCH ACTIVITIES***

## 2B.1. THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

### RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical molecular physics applied to the study of astrophysical species and to the characterization of atmospheric pollutants.
- Condensed Matter Theory.

### RESEARCH SUBLINES:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Loop Quantum Cosmology.
- Quantum Field Theory in Curved Spacetimes.
- Non-local quantum gravity.
- Multiscale spacetimes.
- Gravitational waves (LISA Consortium).
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear Structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric non-rigid molecules.
- Formation of Volatil Organic Compounds from organic radicals.
- Photodissociation of organic readicals.
- Mesoscopic and strongly correlated quatum systems.
- Integrable quantum models.
- Topological quantum matter.
- Quantum thermodynamics.

### EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Combinatorics and number theory.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Highly correlated ab initio calculations and new computational tools.

### RESEARCH ACTIVITY:

#### GRAVITATION AND COSMOLOGY

The Gravitation and Cosmology Group has continued the research in Loop Quantum Cosmology and its application to the primeval Universe, investigating the consequences on cosmological perturbations. The studied perturbations are not only perturbations on the geometry, but also on scalar fields (leading to scalar and tensor primordial perturbations) and on fermionic fields.

During this year, great part of the work has been devoted to the consideration of an alternate regularization of the Hamiltonian constraint of Loop Quantum Cosmology, other than the one that was originally proposed in the literature. This alternative is frequently called the Dapor-Liegener regularization for Loop Quantum Cosmology. In past years, we had already discussed its implementation in a homogeneous and isotropic cosmology, obtaining a quantum description of a Universe like ours in average. In 2020 we have extended this study to homogeneous and anisotropic cosmologies and, furthermore, to perturbed cosmologies that contain small anisotropies and inhomogeneities. Using the hybrid quantization approach within Loop

Quantum Cosmology, approach that was introduced some ten years ago by our group, we have obtained the dynamical equations that rule the propagation of cosmological perturbations in the very primordial Universe, containing quantum corrections that are important in remote epochs close to what we classically would refer as the Big Bang. These dynamical equations are similar to the equations found in General Relativity, but the effective time-dependent mass that the perturbations feel differs from the result of the Einsteinian theory when the quantum geometry effects are important. We have analyzed the behavior of this effective mass, in particular around the bounce that replaces the Big Bang in Loop Quantum Cosmology. We have shown that this mass has a nice behavior in the hybrid approach to the quantization, while this is not the case in other approaches (like e.g. the so-called dress metric approach). These results allow for a detailed treatment of the primordial perturbations with guarantees of success in the Loop quantization with the new regularization, including the calculation of the power spectra of the perturbations, which could be compared with observations.

Another important part of our work has been focused on the discussion of fermionic perturbations corresponding to a Dirac field. In particular, we have shown how the criterion of asymptotic Hamiltonian diagonalization, originated in hybrid Loop Quantum Cosmology, serves to select a unique vacuum for the Dirac field in de Sitter cosmologies, in the context of quantum field theory in curved spacetimes. The employed criterion is based on attaining a proper dynamical definition of annihilation and creation variables for the fermionic field, with an associated Hamiltonian of asymptotically diagonal form. This leads to fermionic variables that possess a precise asymptotic expansion in the ultraviolet limit of large wavenumbers. We have proven that, when the cosmological background is fixed as a de Sitter solution, this expansion uniquely determines the choice of fermionic annihilation and creation variables for all spatial scales, and thus picks out a privileged Fock representation and a vacuum state for the Dirac field.

We have also investigated the gravitational production of scalar dark matter particles coupled to the curvature during the inflationary and reheating epochs. We have developed an analytical approximation to describe the relevant resonance effect and its consequences on the ultraviolet regime thus allowing us to constrain the possible values of the phenomenological field parameters to be considered as a dark matter candidate.

We investigate the effects of vacuum polarization on vacuum static spherically symmetric spacetimes. We start from the Polyakov approximation to the renormalized stress-energy tensor and find all the solutions to the semiclassical field equations in vacuum. The resulting counterpart to the Schwarzschild classical geometry substitutes the presence of an event horizon by a wormhole throat that connects an external asymptotically flat region with an internal asymptotic region possessing a naked singularity: there are no semiclassical vacuum solutions with well-defined Cauchy surfaces. We have analyzed asymptotically flat, spherically symmetric spacetimes in which an event horizon is present without any trapped surfaces and identified two types of such spacetimes, each related to the asymptotic behavior (in time) of one of the two degrees of freedom of the metric. One almost always has a Cauchy horizon beyond which it is extendable, while the other is inextendable but has two separate future null infinity regions on either side of the horizon. We have also studied what energy conditions can be satisfied by the matter around the horizon.

We have analyzed the quantization of a scalar field in the presence of an external electromagnetic classical field in a flat background and found a natural Fock representation that admits a unitary implementation of the quantum field dynamics. It automatically allows to define a particle number density at all times in the evolution with the correct asymptotic behavior, when the electric field vanishes. Moreover, we have shown the unitary equivalence of all the quantizations that fulfill our criteria, so that they form a unique equivalence class. Although we have performed the field quantization in a specific gauge, the procedures taken in different gauges are equivalent.

With respect to gravitational waves, our activity mainly focused on definitory projects of LISA science. On one hand, we published the “manifesto” of the Fundamental Physics Working Group, where we established our vision on what signals of physics beyond general relativity should be looked for with this experiment, what models and theories to give priority to in such a search and what characteristics to explore more in detail: modified dispersion relations, violation of the equivalence principle and of fundamental symmetries, dark-energy models, dark-matter models, black-hole models, and so on. During the year we have also been preparing the White Paper of the Cosmology Working Group, still in progress. We are coordinating the section on the stochastic gravitational-wave background, one of the tasks required to Consortium full members, a category we entered in 2020.

Related to these topics, but developed outside of the LISA Consortium, we highlight a paper on the stochastic gravitational-wave background in quantum gravity, a project which took several months of effort. We explored for the first time the production of a stochastic background in a catalogue of various cosmological models stemming from theories of quantum gravity and established which models could produce a blue-tilted spectrum at the frequencies of present and future interferometers. String-gas cosmology, the new ekpyrotic scenario, Brandenberger-Ho non-commutative inflation and multi-scale spacetimes can produce a signal detectable by DECIGO and, in the case of the new ekpyrotic scenario, also by the Einstein Telescope, a mission in which the IEM is participating. However, none of these models reach the sensitivity curve of LISA or of the LIGO-Virgo-KAGRA network. Contrary to what expected in the literature, non-local quantum gravity, one of the main theories investigated by the group, does not produce a detectable stochastic gravitational-wave background. This is due to the fact that the high-frequency spectrum tends to the one predicted by Starobinsky inflation, whose amplitude is



much lower than any experimental sensitivity curve. These and other results have been summarized in the chapter of a Handbook of Gravitational-Wave Astronomy to be published by Springer in 2021.

The main milestone reached in the study of multi-scale theories has been verifying the possibility to generate late-time cosmic acceleration in one of the four theories developed by the group since 2010. In this theory, dark energy can be interpreted as phenomenon derived from a non-standard expansion not due to a scalar field nor to curvature effects, but to the multi-fractal structure postulated for spacetime geometry and realized by an integro-differential calculus specific to multi-scale and fractal systems. This explanation of dark energy is natural in the sense that it does not entail a fine tuning of the parameters of the theory.

Last, we highlight our participation in the coordination and writing of Volume 9 of CSIC White Book, published by Editorial CSIC within a collaboration at the national level with all the main CSIC groups in theoretical physics, astrophysics and cosmology. In particular, we contributed to the writing of chapter 4 “Origin and Fate of the Universe” on inflation, baryogenesis, dark matter, dark energy and gravitational waves, and to the coordination and writing of chapter 7 “Gravity” on quantum-gravity and high-energy models applied to cosmology and gravitational phenomena in general.

Some of the research topics in gravitational physics make use of specific mathematical techniques involving combinatorics and number theory. For instance, the studies carried out by members of the group on the spectrum of the area operator required the use of analytic number theory methods. In the course of these investigations it has been necessary to derive and characterize some new identities involving Bernoulli numbers. These were first conjectured with the help of symbolic algebra software and the OEIS (online encyclopedia of integer sequences) and then proved (*Comptes Rendus. Mathématique*, 357 (2020) 1, 41-44). In a similar fashion we have applied our knowledge of asymptotic methods in analytic number theory (developed in the course of the work on black hole entropy that we carried out some years ago) to the study of the asymptotics of the rescaled Appell polynomials (a large family of which includes the Bernoulli, Euler, Hermite and Laguerre polynomials). Given a sequence of polynomials  $p_n$  it is often interesting to locate their zeros and, after rescaling the argument in an appropriate way, determine the limiting curves (attractors) to which these approach when  $n$  goes to infinity. Also, it is important to find out the asymptotic behavior of these polynomials in this limit (see *Advances in Applied Mathematics* 113 (2020) 101962). These ideas play a relevant role in the statistical mechanics treatment of phase transitions in thermodynamical systems.

During the year we have continued with our work on the Hamiltonian description of gravitational systems, in particular we have developed novel approaches (involving the Gotay, Nester, Hinds approach and other methods that rely on the direct use of the field equations) and applied them to the study of Holst action, which is known to lead to the real Ashtekar formulation of general relativity. Several papers on this subject, some of them completed during 2020 (see arXiv:2011.00661 [gr-qc]) will appear in 2021. The most important result in this respect is the identification of a very simple, fully Lorentz invariant Hamiltonian description for general relativity from which the usual real Ashtekar formulation can be derived.

## THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

### Electron Capture in Superheavy Nuclei

Half-lives of beta decay and electron capture processes are studied in some selected superheavy nuclei which are produced in the frontier between cold- and hot-fusion reactions. The nuclear structure is described microscopically from deformed self-consistent Skyrme Hartree-Fock mean-field calculations that include pairing correlations. The sensitivity of the half-lives to both deformation and Q-EC energies, which are still not determined experimentally, is studied. The results for the beta/EC half-lives are compared with phenomenological alpha-decay half-lives, demonstrating that the latter decay mode is much faster and dominates in most cases.

The search of new regions of nuclear stability in superheavy nuclei is a very active and successful line of research that has already led to the discovery of new elements. First calculations of binding energies within macroscopic-microscopic models predicted the existence of islands of stability, confirmed later by more fundamental calculations. In parallel, different experimental strategies were successfully carried out to reach the theoretically predicted islands of stability for superheavy nuclei. The cold-fusion approach was used first to synthesize nuclei with  $Z=107-112$ . A second strategy was developed later, using more asymmetric reactions with both target and projectile having a large neutron excess. These so called hot-fusion reactions result in the production of nuclei with  $Z=112-118$ . Nearly all the superheavy nuclei produced in reactions undergo a chain of alpha decays ending with a spontaneous fission. Identification of the associated alpha-decay chains is the link to establish the original superheavy nucleus produced in the reaction. On the other hand, the nucleus formed, or some of its decay products, could also decay by electron capture and beta-decay converting a proton into a neutron. Therefore, it is of great interest to study the competition between beta/EC and alpha decay modes. These new decay branches would open the possibility of reaching other superheavy nuclei not belonging the original alpha-decay chains. In our work the focus of attention is the beta/EC decay mode in superheavy nuclei that so far has been studied only at a phenomenological level. We calculate the decay microscopically from an effective nucleon-nucleon interaction within a deformed selfconsistent mean-

field Hartree-Fock calculation with Skyrme forces and pairing correlations in the BCS approximation. Taking into account all the uncertainties in the results from both alpha and beta/EC decays, it is found that in general the half-lives of the latter are much larger than those of the former. However, comparable half-lives between alpha and beta decay modes have been found in some transfermium isotopes (Md, No, Lr, Rf, Db, Sg, Bh, Hs, and Mt), thus favoring new branches of decay in the beta+/EC direction that have not yet been sufficiently studied. This opens new possibilities to reach unexplored roads towards the predicted islands of stability.

### **Nuclei as three-body systems with mean field interactions**

An important aspect of the work recently developed has been the implementation of a new method that permits to construct the interaction between clusters from a standard mean field calculation. More precisely, the idea has been to take into account the structure of the core in order to build a mean field interaction, which is 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  $^{26}\text{O}$ , 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  $^{25}\text{O}$ . We have also investigated two-proton radiative capture reactions by means of the  $^{68}\text{Se}$  nucleus, investigating, in particular, the capture mechanism of the process. We have observed that, when possible, the sequential mechanism is preferred to the direct capture reaction. Finally, the  $^{70}\text{Ca}$  nucleus has been used to investigate the appearance of halo structures when the neutron dripline is progressively approached. In the same work we have studied under what conditions nuclear excited states can be considered as Efimov states. More recently, the applicability of the method to nuclei in the vicinity of the valley of stability has been investigated. We have found that the clusterized structure of the systems is not imposed by the method, but it appears naturally when approaching the neutron or proton driplines.

### **Confinement of two- and three-body systems**

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

For two-body systems the numerical implementation of the external field is simple, and it does not present particular problems. However, for three-body systems, although conceptually the procedure is exactly the same, the numerical difficulties increase when the frequency of the harmonic oscillator increases. In fact, for very large frequencies, i.e., when approaching 2D, the method is quite inefficient. For this reason, in our work we propose to implement the confinement of the particles, not by means of an external potential, but by introducing the dimension  $d$  as a parameter in the Schrödinger (or Faddeev) equations to be solved. The dimension is then allowed to take non-integer values within the range  $2 \leq d \leq 3$ .

The purpose of this work is twofold. First, we want to see the connection between the two confinement methods mentioned above. It is necessary to see the equivalence between a given value of the confining harmonic oscillator frequency and the dimension  $d$  describing the same physical situation. Once this is done, we shall use the second method, which is numerically much simpler, to investigate the Efimov states in mass imbalanced systems, focusing in particular on how those states disappear when increasing the confinement of the particles.

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

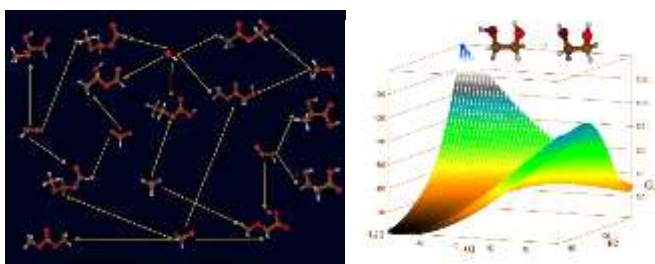
During 2020 the H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 "*Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)*" project has been launched. This project is coordinated from the Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) and from the Theoretical Chemistry group of the Department of Theoretical Chemistry and Physics in collaboration with the Associated Unit with the University of Huelva.



ATMOS designates an international network for a Research and Innovation Staff Exchange (RISE) Marie Curie Action. The main objective is to establish a collaborative effort for the study of scientific problems related to atmosphere pollution elements, with an emphasis on training graduated students in atmospheric sciences. The network comprises eleven scientific groups and 31 senior scientists.

ATMOS focuses on abundant species ( $O_3$ , HCHO,  $HO_2$ ,  $NH_3$ ,...) and their radicals, that have not been fully characterized, and on oxygenated volatile organic species (OVOCs) containing internal rotation groups and their radicals. Basically, the scientific work of the IEM partners concerns the identification and reactivity of OVOC's and organic radicals. The understanding of the processes involving organic compounds in the atmosphere depends on how well these compounds are identified. Quantitative spectroscopic line-by-line modelling in the infrared range (IR) is needed for the current and future atmospheric observations with large scale instruments. Thus, in order to understand their effects in the atmosphere, structural and spectroscopic parameters of such molecular species are needed. Such studies require a large scientific effort focused on the characterization of both known and new species and on the knowledge of the chemical evolution of gas phase sources, of the photochemical induced processes and radical cycles. In the IEM, the main tool for molecular characterization are highly correlated ab initio calculations as well as original Fortran codes for the determination of spectroscopic properties.

It is worth noting that methanol for example has been identified in young or aged biomass burning plumes with large scale instruments thanks to an intensive spectroscopic laboratory work. In the IR range, many spectra of molecules with internal rotors still requires a complete theoretical modelling which must include the vibration-rotation-torsional coupling to provide reliable line-lists for the atmospheric community. This is the case for molecules that have been studied, but without a comprehensive accurate modelling of all their vibration-rotational bands. An additional complication for the modelling arises at higher energies, since the number of vibrational states that can interact with the set of torsional levels. Moreover, the density of torsional levels, increases compared to the lower frequency range of the millimeter, sub-millimeter or far-infrared spectra.



Another important objective is the reactivity. Atmospheric organic pollutants can act as precursors for chemical reactions which can produce free radicals. The study of atmospheric radical cycles presents important challenges as radical cycles are not well understood. Systematic studies of the precursor organic gases and their properties are vital. Although many processes involve only the ground electronic states, some radical formation and dissociation processes implicate electronic excitation in the UV and visible regions, the identification of the Rydberg and dissociative electronic states probed require collaboration between experiments and theory. The tools for reactivity are highly correlated ab initio calculations, density functional theory, and Fortran codes for the determination of kinetic rates.

During 2020, the original code ENEDIM has been upload to treat systems with three or more large amplitude motions. The new subroutines have been applied to the study of astrophysical molecule ethylene glycol and its deuterated isotopologues. A big effort has been dedicated to the spectroscopy and formation through barrierless processes of acetone. This species, which is an important pollutant is also astrophysical molecule and can be formed form the  $CH_3CO$  and  $CH_3COCH_2$  radical which have been characterized. In addition, a large work has been performed for the study of  $C_3O_3H_6$  isomers. For these species 29 barrierless formation processes from radicals have been identify.

Some of the studied VOCs and radicals are also relevant astrophysical non-rigid molecules detected in gas phase sources of the interstellar medium. This is the object of our projects FIS2016-76418-P and COOPB20364.

## CONDENSED MATTER THEORY

### Spintronics with topological semimetals

Topological materials have attracted great interest in the last decade since they exhibit new fundamental phenomena and hold great promise for far-reaching technological applications. Gapless systems assemble the family of topological semimetals, where the valence and conduction bands only touch at a zero-measure set of points in the Brillouin zone. Topological Weyl and Dirac semimetals are three-dimensional phases of matter in which these isolated touching points are protected by topology and symmetry. Near these nodes, the dispersion relation appears as a three-dimensional analogue to graphene and can be described by an anisotropic version of the Weyl or Dirac equation so the low-energy quasiparticles behave as relativistic fermions. One of the main manifestations of the topological properties is the presence of surface states in bounded regions of the momentum space. For this reason, these surface states are called Fermi arcs. We have studied the effect of the Rashba spin-orbit coupling on the Fermi arcs of topological semimetals. The Rashba coupling is induced by breaking the inversion symmetry at the surface. Remarkably, this coupling could be enhanced by the interaction with the substrate and controlled by an external electric field. We study analytically and numerically the rotation of the spin of the surface states as a function of the electron's momentum and the coupling strength. Furthermore, a detailed analysis of the spin-dependent two-terminal conductance is presented. Depending on the magnitude of the quadratic terms in the Hamiltonian, the spin-flip conductance may become dominant, thus showing the potential of the system for spintronic applications.

### Ergodicity, chaos and localization in quantum disordered spin chains

One of the most striking exceptions to thermal behavior in many-body quantum systems: the transition to many-body localization (MBL). The MBL phase is an insulating quantum phase of matter that emerges in some disordered interacting many-body systems, like the paradigmatic one-dimensional spin chain, when the disorder is large enough.

We have studied the ergodic side of the many-body localization transition in its standard model, the disordered Heisenberg quantum spin chain. We show that the Thouless energy, extracted from long-range spectral statistics and the power-spectrum of the full momentum distribution fluctuations, is not large enough to guarantee thermalization. We have found that both estimates coincide and behave non-monotonically, exhibiting a strong peak at an intermediate value of the disorder. Furthermore, we have showed that non-thermalizing initial conditions occur well within the ergodic phase with larger probability than expected. We have proposed a mechanism, driven by the Thouless energy and the presence of anomalous events, for the transition to the localized phase.

### Integrable models for dissipative quantum systems

Richardson-Gaudin (RG) integrable models can be traced back to the original works of Richardson for the exact solution of the BCS model of superconductivity during the sixties and the derivation of the integrable quantum magnet published by Gaudin in the seventies. Both exact solutions were later recovered starting the 2000 in the context of ultrasmall superconducting grains and further combined to give birth to families of exactly solvable models based on the SU(2) algebras. These families of exactly solvable models were extensively applied to closed mesoscopic systems in different areas of many-body quantum physics, like nuclear physics, condensed matter, cold atoms, quantum optics and quantum chemistry. Despite the fact that most of the applications focus on the study of hermitian Hamiltonians, RG models can incorporate non-hermiticity by either using complex coefficients for the linear combination of the integrals of motion, or even integrals of motion with complex internal parameters. Non-hermiticity has a broad area of application in many-body quantum physics. In particular, it is a distinctive feature of the dynamics of dissipative quantum systems. The time-dependent density matrix of quantum systems weakly coupled to a Markovian environment is governed by the Lindblad master equation. This master equation defines a non-hermitian Liouvillian superoperator that acts on the space of density matrices. There are very few examples of non-trivial exactly solvable Liouvillians. In this work we derived the exact solution of a systems of N-level atoms weakly coupled to a high temperature reservoir. Making use, for the first time, of the SU(N) trigonometric family of RG models, we could derive exactly solvable Liouvillians describing the dynamics of open quantum multi-level atom systems. As the simplest example, we showed that the dissipative collective spin model, whose exact solution was already known, can be derived from the SU(2) trigonometric RG model. We then moved to the next degree of complexity and studied in depth the SU(3) RG model that describes dissipative systems of 3-level atoms. We worked out in detail the particular combination of trigonometric SU(3) integrals of motion that give rise to the desired Liouvillian, as well as the corresponding mathematical form of the eigenvalues depending on two sets of spectral parameters that are fixed by the solutions of non-linear coupled RG equations. In spite of the complexity of the trigonometric SU(3)-RG equations, we were able to solve them exactly and to study the properties of the solutions for the steady state and for several slow decaying states for systems with a large number of atoms. These exact solutions were interpreted in terms of a two-dimensional electrostatic-like equilibrium problem for the position of the spectral parameters in terms of a two-dimensional electrostatic-like equilibrium problem for the position of the spectral parameters in the complex plane. We expect that these new exactly solvable models of dissipative

N-level atom systems will add up to the comprehension of the dynamics of open quantum systems, and be useful to benchmark the various approximations to the problem many-body open quantum systems.

### **Dynamical breakdown of symmetry in twisted bilayer graphene**

One of the most relevant questions about the striking behavior of twisted bilayer graphene has to do with the origin of the strongly correlated phases observed at the so called magic twist angle. Those phases are characterized by insulating behavior at integer fillings of the electron system, and they have got a lot of attention as they are considered in several cases as the parent of nearby superconducting phases.

In that perspective, we have studied the broken-symmetry phases that may arise in the twisted bilayer at the magic angle, and which develop as a consequence of the strong electron-electron interaction. For that purpose, we have devised a self-consistent Hartree-Fock approach in real space, taking as starting point the tight-binding model of twisted bilayer graphene and adding the interaction potential at the level of the electron self-energy. In this way, we have been able to discern the effects of the Hubbard and the long-range Coulomb interaction, which lead in general to different competing trends in the phase diagram. From a technical point of view, the approach reverts to the resolution of a set of self-consistent equations, as the self-energy is built from the same energy eigenstates one seeks to find. The problem has demanded the diagonalization of matrices with large dimension according to the number of atoms ( $\sim 10,000$ ) in the unit cell of the twisted bilayer. In practice, we have managed to perform a recursive approximation to the electron propagator in which good convergence is achieved by building the self-energy at each step with the eigenvectors obtained in the previous iteration.

We have analyzed different phases which may arise from the dynamical breakdown of symmetry at the charge neutrality point of twisted bilayer graphene, and which should account for the gap observed experimentally in the electronic spectrum at the magic angle. When the Coulomb interaction is screened by metallic gates, we have seen that the opening of a gap between the lowest-energy valence and conduction bands proceeds through the breakdown of chiral symmetry at strong coupling. Increasing the dielectric screening, however, we have found a critical coupling at which chiral symmetry breaking is suppressed, triggering a very strong signal for time-reversal symmetry breaking with Haldane mass. On the other hand, when the long-range tail of the Coulomb interaction is not screened, we have seen the appearance of yet a different dominant pattern at strong coupling, which is characterized by breaking the time-reversal invariance but with opposite flux in the two sublattices of the carbon layers, with the consequent valley symmetry breaking. In this case a gap is also opened between the Dirac cones, but superposed to the splitting of the degeneracy of the low-energy bands at the K points of the moiré Brillouin zone.

Our investigation highlights that twisted bilayer graphene is a complex system where the interplay between different degrees of freedom (two valleys, two layers) leads to a number of condensates signaling the breakdown of symmetry. The resulting picture is that several transitions take place between different phases as one modifies the strength of the Coulomb interaction. This mainly favors the breakdown of chiral and time-reversal symmetry, whose order parameters tend to compete along the phase diagram and become alternatively dominant at different regimes of the coupling strength.

## 2B.2. NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT

### RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Nuclear Structure studied at intermediate energies.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Bionanospectroscopy.
- Molecular Detection Based on Optical Spectroscopy on Nanostructures.
- Advanced instrumentation.
- Spectroscopic techniques for the design, develop and durability of artificial building materials.
- SERS studies of admixture/binder interactions.
- New artificial building materials from recycled waste materials.
- Design of sensors based on calcium silicates.
- Portable techniques for the study and characterization of ancient and new materials from the Cultural Heritage.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.

### RESEARCH SUBLINES:

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

### EMPLOYED TECHNIQUES:

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

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

## RESEARCH ACTIVITY:

### NEAR COULOMB BARRIER SCATTERING WITH $^{208}\text{Pb}$ TARGETS: THE CASES OF $^{15}\text{C}$ AND $^{17}\text{Ne}$

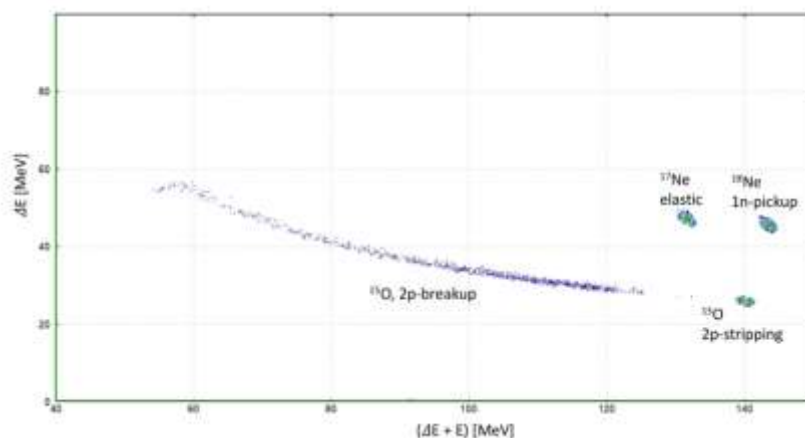
(J. D. Ovejas, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge et al.)

Despite having a rather large separation energy for the last valence neutron ( $S_n=1218$  keV), the almost pure s-wave feature of the  $^{15}\text{C}$  ground state wavefunction seems to give a halo behavior to this nucleus in different reactions. This halo structure has also been suggested from high-energy studies, where a large total interaction cross section and peaked momentum distributions (both longitudinal and transversal) of the fragments following breakup into  $^{14}\text{C}+n$  have been seen.

Late 2017, with two of new cryomodules installed at the linac of HIE-ISOLDE (CERN, Switzerland), we could study the near-barrier scattering of  $^{15}\text{C}$  for the first time ever [IS619]. The goal of the experiment is to measure the angular distribution of the elastic scattered  $^{15}\text{C}$  at 4.37 MeV/u beam energy impinging on a  $^{208}\text{Pb}$  target. The aim is to determine if the halo is manifested with a strong absorption pattern, as is the case for other halo nuclei, such as  $^6\text{He}$ ,  $^{11}\text{Li}$  and  $^{11}\text{Be}$ . Further, to study the competition with other reactions channels like n-breakup or n-transfer to the  $^{208}\text{Pb}$  target.

GLORIA an array of silicon telescopes [NIM A755(2014)69-77] was used to detect the scattered charged particles, allowing for the separation of the different beam components and possible reaction fragments. A Monte Carlo simulation, using the Geant4 toolkit [NIM A506 (2003)250-303], of the detector setup was developed in order to verify the acquired experimental data, which were analyzed using the ROOT package [<https://root.cern/>] of CERN. During the detection simulation, the thickness of the  $\Delta E$  detectors were optimized to improve the energy-resolution in the data-set. Specific attention was put to the channeling effect of the 50 times more abundant contaminant beam of the  $^{15}\text{N}$ , which partly covers the  $^{15}\text{C}$  scattering region. The quasi-elastic channel was identified and integrated, allowing to determine a classical elastic scattering behavior up to  $60^\circ$ , as CDCC theoretical calculations predict.

In continuation to the  $^{15}\text{C}$  experiment [E788S], we performed in February 2020 at SPIRAL-GANIL (Caen, France), the study of the near-barrier scattering of  $^{17}\text{Ne}$  at 8 MeV/u also on a  $^{208}\text{Pb}$  target. The same GLORIA detector setup was used and the analysis and simulation procedures were analogous to the  $^{15}\text{C}$  case. The nucleus  $^{17}\text{Ne}$  is a clearer case of Borromean structure, interpreted as a  $^{15}\text{O}$  core plus two weakly bound protons ( $S_{2p}=933$  keV) that, also shows a large total reaction cross section and narrow distributions of the  $^{15}\text{O}$  fragments after breakup. This time, the beam purity (no present contaminants), good yield, thin target thickness (which directly translates into a better resolution) and the smaller grazing angle of the elastic channel, allowed for a clear and conclusive result for the elastic channel. The greater gap in mass (from  $A=17$  to  $A=15$ ) in the breakup, due to the Borromean configuration, also allowed for an easier differentiation of the reaction channel. This work constitutes the doctoral Theses of Javier Diaz Ovejas, to be defended in spring 2021.



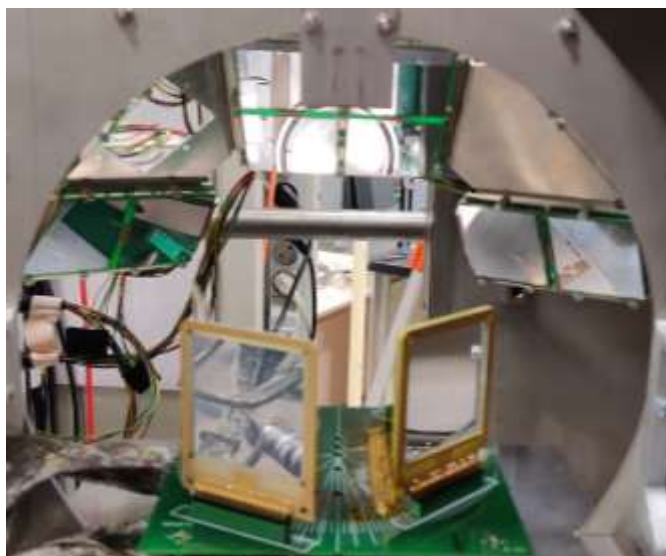
*Fig. Monte Carlo simulation of a forward pixel ( $30^\circ$ ) in the GLORIA detector for the expected channels in the reaction  $^{17}\text{Ne}+^{208}\text{Pb}$  at 8 MeV/u.*

## EXPERIMENT P01047: POPULATION OF STATES $\alpha$ NOT LINKED IN $^{16}\text{O}$ VIA $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$ IN CMAM, MADRID

(J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V.G. Távora)

The  $^{12}\text{C}(a,g)^{16}\text{O}$  reaction is of great importance to Nuclear Astrophysics because of its relevance both in determining the proportion of carbon that is transformed into oxygen, and in the nucleosynthesis of the elements beyond A-16. In the last 60 years there have been many advances in its study, however, the uncertainty of the effective reaction section remains too high. Because there is no state of natural parity in the energy region of interest that serves as resonance for direct radiative capture of  $^{12}\text{C}(a,g)^{16}\text{O}$ , the total effective section is determined by the sum of the resonance tails and direct captures of the fundamental and excited states of  $^{16}\text{O}$ . So we use the reverse nuclear reaction  $^{19}\text{F}(p, a)^{16}\text{O}$  to populate and determine the widths of the unlinked states emitting  $\alpha$  of  $^{16}\text{O}$ .

The experiment on reaction  $^{19}\text{F}(p, a)^{16}\text{O}$  was carried out at the Center for Micro-Analysis of Materials (CMAM) of the Autonomous University of Madrid (UAM) (Spain). We used a 2.6 MeV energy proton beam that interacted with a target of 120 g/cm<sup>2</sup> of MgF<sub>2</sub> (on a C support of 10 g/cm<sup>2</sup>). A segmented silicon detector system (DSSD) was used to measure the angle and energy of outgoing particles. The experimental assembly covered a wide angular range allowing the detection of particles  $\alpha$  emitted at 180° in coincidence. Thus, the main objective of the analysis is to identify two particles  $\alpha$  along with (ideally) the  $^{12}\text{C}$  of matching recoil. Of particular interest are the  $\alpha$  particles that populate states 2<sup>+</sup> and 1<sup>-</sup> of  $^{16}\text{O}$ , located at 6917 KeV and 7116 KeV respectively and which are considered fundamental in radio capture processes. Data analysis is currently taking place.



*Fig. Photo of the detector system and its positions inside the vacuum chamber. At the bottom you can see the segmented silicon detectors (DSSD) and at the top the silicon detectors belonging to the structure known as Silicon Ball.*

## DeepHyp - DEEP LEARNING TECHNIQUES FOR THE STUDY OF EXOTIC HYPERNUCLEI

(Project 2019-T1/TIC-13194 TALENTO Comunidad de Madrid, C. Rappold, S. Esrig Lopez)

Within the WASA@FRS collaboration, the upcoming S447 experiment of hypernuclear spectroscopy is scheduled for March 2022 at the GSI-FAIR facility, Germany. In 2019, the central part of the WASA detector was transported to GSI-FAIR. In the S447 experiment, the WASA central detector system will be combined with the fragment separator (FRS) of GSI. Fragments emitted forward from the hypernuclear decay will be measured by the second-half of the FRS (S2-S4) with an excellent momentum resolution. In the meantime, light particles from the decay of the hypernuclei will be measured by the WASA detectors. The S447 experiment was approved a second time during the General Program Advisory Committee of GSI-FAIR during the meeting of Sept. 2020. The DeepHyp project focus first on the preparation of the S447 experiment, and then on the data analysis of the obtained experimental data. The development of new analysis techniques based on deep learning techniques aims to improve the hypernuclear spectroscopy. The main objective is to tackle the current hypertriton lifetime puzzle and the confirmation of the nn $\Lambda$  observation. The preparation of the experiment has been a main part for the DeepHyp project plan of 2020. The finalization of the Geant4 simulations of the realistic experimental apparatus was carried out. More realistic efficiencies of the particle tracking and event reconstruction were estimated. The ion-optics of S2-S4 was optimized for a high fragment acceptance with a expected resolving power of 5200. New deep learning algorithms are in development for the track finding procedure using graph neural networks. We have started the R&D of a new silicon micro vertex detector for precise estimation of the interaction vertex of the nuclear collisions.

This work forms part of the doctoral Theses of Samuel Esrig López.



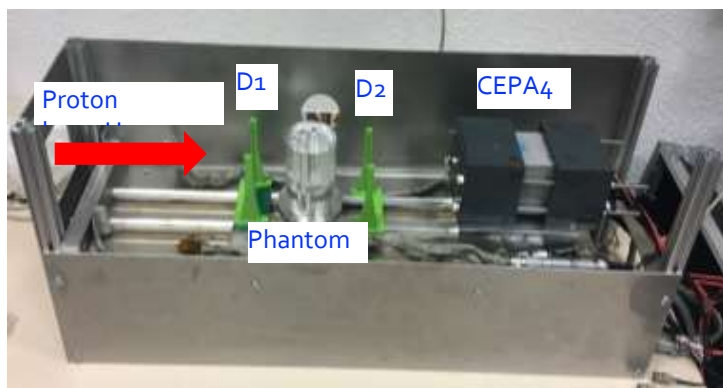
### Proyecto PRONTO-CM B2017/BMD-3888 Comunidad de Madrid & ENSAR2-PASPAG

(J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, V.G. Tavora)

This project is motivated by the advent of protontherapy technique to Spain. Two new centres started its operation at the end of 2019 (Quirónsalud) and in 2020 (Clínica Universitaria de Navarra). The objective of our activities is the design of a prototype of proton scanner using proton Computerized Tomography technique (proton-CT). This would allow us to increase the accuracy of protontherapy treatment plans with respect to current ones obtained using X-rays CT and a better control on the applied dose through the uncertainty reduction in the proton ranges since the same particle (proton) will be used to both, planification and treatment.

In 2019 we carried out a proof-of-concept experiment at the CMAM facility (Universidad Autónoma de Madrid). Using 10-MeV proton beams (the highest energy available in the accelerator) and only silicon detectors we obtained radiograph images of simple phantoms of a maximum of 1-mm thickness. Following the success of the first measurement, during 2020 we proposed experiments at two international proton Facilities: AGOR-KVI cyclotron in Groningen (Netherlands) and Cyclotron Centre Bronowice in Krakow (Poland). Both were accepted due to the high interest in our prototype. Due to technical problems in AGOR-KVI and, mainly, to the restrictions imposed during the COVID-19 pandemic, both experiments were postponed to be performed during 2021.

Our group continued working on the preparation and optimization of the experimental device via Monte Carlo simulations in order to build the prototype which, by the end of 2020, looks like shown in the figure below.



*pCT scanner prototype build in the framework of the PRONTO-CM. The experimental chamber is shown including the main elements of the system: following the path of the proton beam the holder of the D1 silicon detector (Green piece), the phantom to be examined, the holder of the D2 silicon detector (green as well) and finally the CEPA4 detector where protons are fully stopped.*

### IS633: ELECTRON CAPTURE OF $^8\text{B}$ INTO THE HIGHLY EXCITED STATES OF $^8\text{Be}$ . CHARACTERIZATION OF THE RESPONSE FUNCTION OF THE DETECTORS USED IN THE IS633 EXPERIMENT

(S. Viñals, O. Tengblad, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Perea)

The beta +/EC decay of  $^8\text{B}$  is one of the steps in the hydrogen combustion process that takes place in the Sun and it is also the main source of high-energy solar neutrinos, above 2 MeV. In addition to its astrophysical interest, the beta decay of  $^8\text{B}$  gives access to the nuclear structure of  $^8\text{Be}$ . This has a continuum of  $2+$  states due to a wide resonance at 3 MeV. The two states at 16.6 and 16.9 MeV form a  $2+$  doublet, being the only case in which one can expect more than a small percentage of isospin mixture  $T = 0$  and  $T = 1$ . The  $^8\text{Be}$  can be described as an alpha-alpha cluster structure that causes its resonant excited states to break apart into two alpha particles. From the point of view of its nuclear structure, the nucleus  $^8\text{B}$  is the only known nucleus whose proton halo configuration in its ground state is well established. Beta decay to the 17.6 MeV state is expected to be increased by this structure.

We performed an experiment in 2016 at ISOLDE (CERN) with the aim of determining the beta intensity for decays to the excited states of  $^8\text{Be}$ . Of particular interest is the  $2+$  doublet at 16.6 and 16.9 MeV. The second objective is to determine the branching ratio (BR) of the delayed proton emission populated by EC, which had not been observed until now. This decay channel is expected to occur through the 17.6 MeV state and its BR estimate is based on the halo structure of  $^8\text{B}$ . Furthermore, the half-life of nucleus  $^8\text{B}$  has been more precisely determined. To achieve these results, we have precisely characterized the detectors used in the experiment with Geant4 and a deconvolution code has been implemented to obtain the beta population of  $^8\text{B}$  in  $^8\text{Be}$ .

The experimental setup consisted of a “diamond” configuration of four Si detector telescopes. The telescopes are composed by a Double-sided Silicon Strip detector (DSSD) with 16 bands on each side. Behind, a thicker Si detector. Two different thicknesses were used for the front detector of the telescopes; two thicker  $60\ \mu\text{m}$  DSSDs to ensure full detection of the more energetic alphas and two  $40\ \mu\text{m}$  DSSDs that were optimized for an accurate response to beta particles.

From the detection of alphas, the alpha-alpha coincidence spectrum is obtained and corrected for different experimental effects using Geant4. The DSSDs have been characterized and, from this work, the response function of each detector has been obtained, being crucial for the subsequent analysis of R-Matrix and the deconvolution procedure. For the development of the deconvolution code, a systematic study has been carried out, verifying the goodness of the solution obtained for both simulations and experimental data. (EPJA-2021 <https://rdcu.be/ceVWw>).

For the study of delayed proton decay, an anti-coincidence analysis was performed to determine an upper experimental limit for the BR. A simulation of the beta decay of  $^8\text{B}$  has been carried out and once validated, the emission of a proton peak has been simulated to determine the limit at which it would be visible on the experimental background.

In short, the results obtained and defended in the presentation of the Doctoral Theses of Silvia Viñals i Onses on 11.12.2020 are;

- Reduction of the uncertainty in the value of the half-life by a factor 3.1 with respect to the last published value.
- The isospin mixing parameters have been determined using a R-Matrix analysis, confirming the shell-model calculation that established a complete isospin mixing.
- The Richardson-Lucy algorithm has been implemented in C ++. It has been tested on simulated distributions and has been shown to be significant in obtaining the composition of an alpha source.
- From the beta population spectrum, the beta intensity distribution has been obtained and it has been determined that the value of  $B(\text{GT})$  is 0.8 (2)

An experimental upper limit for the BR for the beta-p emission of  $2.5 \times 10^{-6}$  (99.9%) has been determined.

### THE NUCLEAR STRUCTURE OF SUPER-HEAVY NUCLEI

(FPA2017-84756-C4-2-P, Andrea Jungclaus, J. Luis Egido)

Motivated by recent experimental progress, we presented the first triaxial beyond-mean-field study of even-even super-heavy nuclei (J.L. Egido and A. Jungclaus, Phys. Rev. Lett. 125, 192504). Calculations for the even Flerovium isotopes towards the supposed  $N=184$  neutron shell closure were performed using the effective finite-range density-dependent Gogny force. They include the restoration of the particle-number and angular-momentum symmetries and the mixing of different shapes using the generator coordinate method. The importance of the  $\gamma$  degree of freedom is highlighted by comparing the triaxial to axial-symmetric calculations performed within the same framework. For the three even Fl isotopes between the prolate  $^{288}\text{Fl}$  and the oblate  $^{296}\text{Fl}$  triaxial ground-state shapes are predicted, whereas axial-symmetric calculations suggest a sharp prolate-oblate shape transition between  $^{290}\text{Fl}$  and  $^{292}\text{Fl}$ . A novel type of shape coexistence, namely, that between two different triaxial shapes, is predicted to occur in  $^{290}\text{Fl}$ . Finally, the existence of a neutron shell closure at  $N=184$  is confirmed, while no evidence is found for  $Z=114$  being a proton magic number. A second manuscript, presenting predictions for the excitation schemes of the members of the experimentally accessible alpha-decay chains of  $^{294}\text{Og}$  and  $^{292}\text{Lv}$ , has already been submitted for publication.

### EXPERIMENT NP1712-RIBF145R1: FIRST GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF THE $T_z=-2$ NUCLEUS $^{56}\text{Zn}$

(FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

Excited states in  $^{56}\text{Zn}$  were populated following one-neutron removal from a  $^{57}\text{Zn}$  beam impinging on a Be target at relativistic energies in an experiment conducted at the Radioactive Isotope Beam Factory (RIBF) at RIKEN. Three gamma rays were observed and assigned to form the  $6^+ \rightarrow 4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$  yrast sequence, thus turning  $^{56}\text{Zn}$  into the heaviest  $T_z=-2$  nucleus in which excited states are known. The excitation-energy differences between these levels and the isobaric analogue states in the  $T_z=+2$  mirror partner,  $^{56}\text{Fe}$ , are compared with large-scale shell-model calculations considering the full pf valence space and various isospin-breaking contributions. This comparison, together with an analysis of the mirror energy differences in the  $A=58$ ,  $T_z=\pm 1$  pair  $^{58}\text{Zn}/^{58}\text{Ni}$ , provides valuable information with respect to the size of the radial and nuclear isospin-breaking terms in the region above  $^{56}\text{Ni}$ . The results of this work are currently being prepared for publication.

Since 2017 the group develop a research project in collaboration with Dr. María Pilar de Lara-Castells (CSIC-IFF) and collaborators focused on the multiscale study from first principles of systems and processes of interest in nanoscience. It is a natural continuation of lines of research carried out in the group in the recent years. In this regard, the group's research is relevant in social areas such as energy, catalysis, novel materials and the science industry with an emphasis on the reduction of the environmental impact. Currently, two would be the general themes in which our research is framed, as shown below:

## PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

In 2020, in collaboration with Dr. Lenor Chico's group, we have theoretically shown how carbon nanotubes of adequate diameters and chiralities present, in their collapsed geometrical configuration, a series of properties in their electronic structure that are characteristics of the recently discovered twisted bilayer graphene that surprisingly show superconductivity.

We have also studied atomic diffusion and structural changes thermally induced in nanoparticles of gold with iron, cobalt and nickel cores.

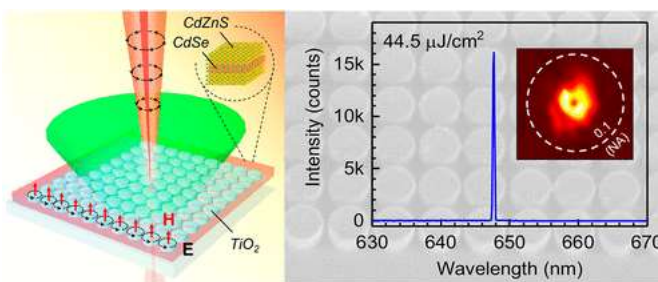
## GLASSY PHENOMENOLOGY IN CRYSTALS WITH MINIMUM DEGREE OF DISORDER

In this line, we collaborate with the group of Prof. Josep Tamarit of the Universidad Politécnica de Barcelona. The efforts in recent times have focused on the study of crystalline systems which, due to the presence of some kind of disorder, present, at least in part, the same phenomenology exhibited by disordered media in their thermal, mechanical or dielectric properties at low temperature. Such a disorder can be of a static nature, generated for instance by differences in the distribution statistics of a substituent, or of a purely dynamic nature. The purpose of this line of research is that these materials, by presenting a quantifiable type of disorder, make it possible to unequivocally identify the microscopic entities capable of coupling with the acoustic field and generate the phenomena that give rise to the aforementioned anomalies (two levels, "soft" modes, etc.). During 2020 we have studied and analyzed by dielectric spectroscopy and theoretical modeling the orientational glass transition in the orientational plastic crystal 2-adamantanone.

## OPTICAL PROPERTIES OF METASURFACES: BOUND STATES IN THE CONTINUUM

We have continued our ongoing work on planar periodic arrays (metasurfaces) of resonant dielectric and plasmonic subwavelength structures with special emphasis on bound states in the continuum (BICs). BICs have attracted much interest lately in photonics for their (theoretically) infinite Q factor. These states are leaky modes that in a certain limit of some parameter space cannot couple to any radiation channel. In order to trap light in such nearly-zero-linewidth electromagnetic modes, a common approach is to exploit metasurfaces: outgoing specular channels can be suppressed by tuning the parameters of the system in various manners, leading to symmetry-protected BICs. On the basis of a generalized coupled electric/magnetic dipole theory for infinite arrays, a variety of scenarios has been investigated where single/double meta-atoms can be simply described by a combination of various electric (ED) and/or magnetic dipoles (MD). Our theoretical work has been developed in collaboration with the Donostia International Physics Center, supported in turn by MICIU Excelencia Projects LENSBEAM & MELODIA. Furthermore, we have demonstrated that:

- Simple configurations of Si nanodisk metasurfaces with MD resonances can support robust, symmetry-protected BICs, experimentally confirmed by the groups of Sunhuke Murai (*Kyoto University*) & Jaime Gómez Rivas (*Surface Photonics, Technical University of Eindhoven*).
- in collaboration with Arseniy Kuznetsov & Ramón Paniagua (*Institute of Materials Research and Engineering, IMRE, Singapur*) room-temperature lasing has been achieved using as a "mirror-free cavity" a BIC in a planar TiO<sub>2</sub> nanodisk metasurface, with colloidal nanoplatelets as gain medium. (see attached figure).
- extremely narrow electromagnetic transparency induced by BICs in high-refractive-index disk metasurfaces, as a result of the destructive interference between such states and MD leaky resonances (perpendicular to each other), demonstrated experimentally in the GHz domain by the group of Jean-Michel Geffrin (*Institut Fresnel, Marsella*) y Fernando Moreno (*Universidad de Cantabria*).



## FUNDAMENTAL OPTICAL PROPERTIES OF DIELECTRIC PARTICLES

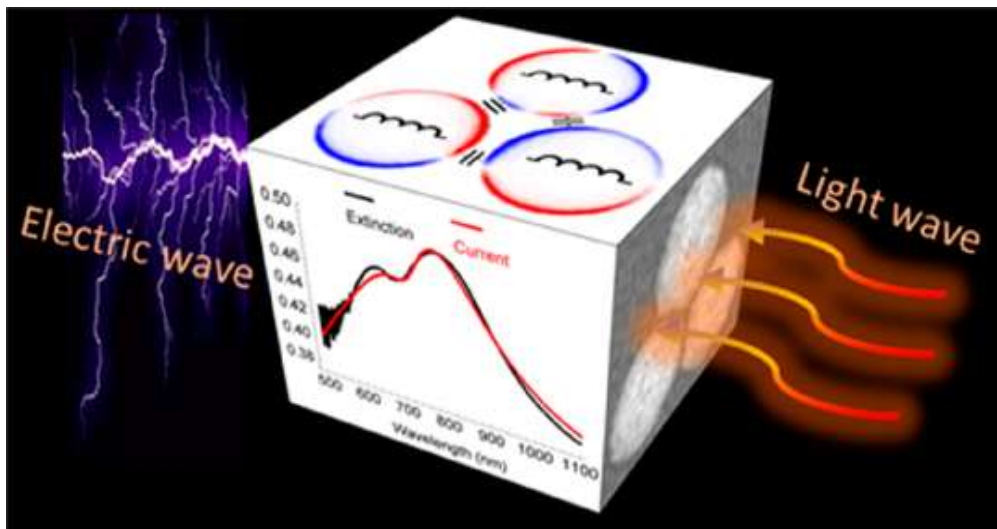
In collaboration with group of Juan J. Sáenz at the Donostia International Physics Center, we have investigated the fundamental scattering properties of dielectric (Mie) particles whose optical response can be accounted for by dielectric and magnetic (despite being non-magnetic) dipoles. In particular, three fundamental properties have been addressed analytically:

- First Kerker condition, namely, the absence of backscattering light: we have demonstrated that either losses or optical gain inhibit the first Kerker condition for homogeneous spheres regardless of the particle's size, incident wavelength, incoming polarization, and multipole order. It follows that dissipating spheres such as dielectric Mie spheres in the visible spectral range and plasmonic particles, such as metal spheres, cannot exhibit the first Kerker condition.

- Second Kerker condition, namely, the quasi-absence of forward scattered light: we showed that the generalized second Kerker condition is clearly insufficient to give rise to the nearly zero optical forward scattering, in striking contrast to the actual view of the problem. In fact, it leads to an energy radiation pattern that ranges all possible optical scattering diagrams depending on the total scattering cross section. Interestingly, we demonstrated that optimization of backward intensity, near the electric and magnetic dipolar resonances, leads to the counterintuitive result of a far-field energy radiation pattern with nearly zero backscattering.
- Dipolar scattering regimes: we have demonstrated that the helicity of an incoming beam is not preserved when several multipoles contribute to the scattering. This inhibits the usual link between duality restoration and zero optical backscattering condition. In addition, we have shown that the helicity conservation in the scattering by high-refractive index dielectric Mie spheres can be used as a probe of pure-multipolar spectral regions, particularly of dipolar nature, beyond its presumed spectral interval.

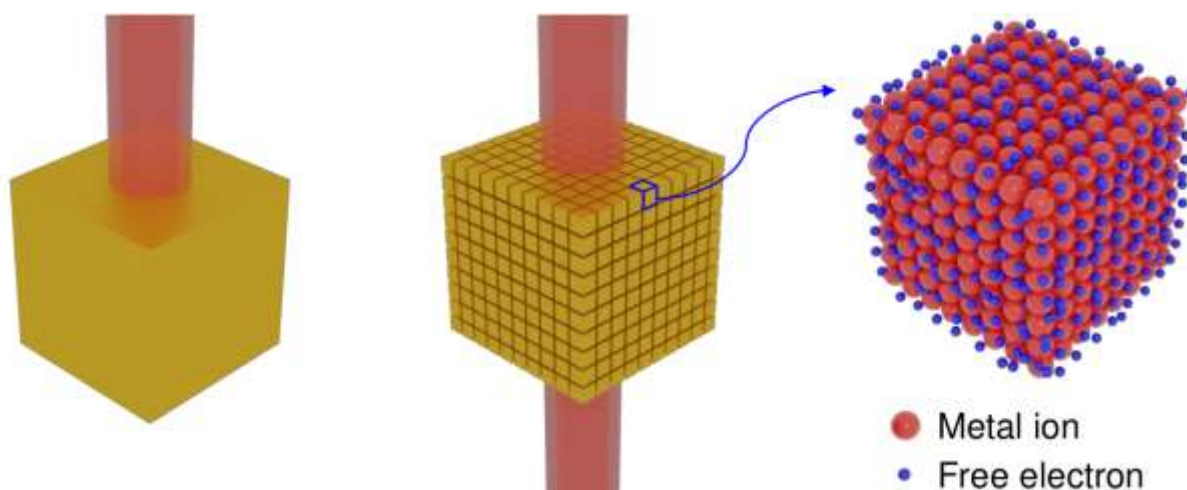
## TOPOLOGICAL NANOFOTONICS

There is great interest in understanding the topological properties of optical systems. This interest in topological photonic systems is due to their ability to host states protected against disorder and perturbations, they allow us to do with photons what topological insulators do with electrons. Topological photonics can refer to electronic systems coupled with light or purely photonic setups. By shrinking these systems to the nanoscale, we showed how can harness the enhanced sensitivity observed in nanoscale structures and combine this with the protection of the topological photonic states, allowing us to design photonic local density of states and to push towards one of the ultimate goals of modern science: the precise control of photons at the nanoscale. This is paramount for both nanotechnological applications and fundamental research in light matter problems. For purely photonic systems, we work with bosonic rather than fermionic states, so the implementation of topology in these systems requires new paradigms. Trying to face these challenges is helping in the creation of the exciting new field of topological nanophotonics, with far-reaching applications.



## EXTRAORDINARILY TRANSPARENT COMPACT METALLIC METAMATERIALS

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



**Figure 1** Metallic metamaterial concept. *a)* Highly opaque of bulk metal. *b)* Extraordinarily transparent compact metallic metamaterials. Each particle is composed of massive metallic atoms. The electrons only move freely within the confines of the metallic particles. In this sense, these particles can be considered as the ‘meta-molecules’ or ‘-atoms’ in traditional bulk dielectrics.

## NANOFABRICATION

The nanofabrication of nanostructures with advanced optical properties was one of the main objectives of our group during 2020. 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). In this period, we have focused our attention on the fabrication of chips for selective detection of persistent organic pesticides (POPs).

## 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 2020. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems. Functionalization experiments derivatives of calixarenes were employed to improve the detection ability of these systems. These linkers possess an internal cavity within which molecules difficult to be detected by SERS can be hosted. A new generation of calixarenes was tested during 2020 based on the use of calixarene molecules with different structures addressed to the detection of emerging pollutants such as dioxane and glyphosate. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of the PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

## BIOMOLECULE / NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility and selectivity to the analytical applications of these systems. In order to fulfill this goal, it was conducted a study of interaction of peptides with important role in the development of neurodegenerative diseases such as  $\beta$ -amyloids. We have also started a new collaboration with researchers of the Ramon y Cajal Hospital regarding the detection of important biological tumoral markers based on the analysis of exosomes expelled by cells. These exosomes were demonstrated to contain many biolmolecules that can be used in the characterization of specific cellular processes leading to pathologies.

## **SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF THE CULTURAL HERITAGE**

The application of SERS on the study of the Cultural Heritage was centered on the detection of dyes of difficult study by the normal Raman technique. Another important research line was the in-situ fabrication of silver NPs on natural fibers of wool by laser irradiation. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna, during the stays of a master student in our department. The employ of this type of metallic substrates is very important for the in-situ analysis of artistic pigments and dyes.

The Raman and X-Ray fluorescence spectroscopy were also employed in the analysis and characterization of iron gall inks present in old manuscripts in order to perform a discrimination of the different types of inks employed in the same or similar documents, where different writings, made by different persons under the way of signatures or annotations, were found. The main goals of this work were: a) discrimination of iron gall inks in manuscripts written in the same age on the basis of the Raman and XRF signals; b) identification and assignment of the spectral Raman markers of similar writings and their correspondence with the chemical structure of the components; c) assessment of the effect of aging on the spectral markers in order to find time spectral markers, which can contribute to find out the approximate age of the writings and the possible later modifications made on it throughout the time.

Furthermore, the study by Raman spectroscopy of the materials used in the altarpiece of the Christ of the church of Forfoleda, Salamanca. Three samples from different parts of the Christ were provided by the restorer Carlos Ávila. Stratigrafies of the samples were prepared in collaboration with Dr. Ruth Chércoles of the Fine Arts Faculty of the Universidad Complutense de Madrid. In the first step, the images of the stratigrafies were obtained with an optical microscope, both with visible and ultraviolet light. The Raman spectra of the samples were recorded with a Raman spectrograph coupled to an optical microscope by using an excitation light of 633 nm.

During 2020 we have also worked on the application of spectroscopic techniques to the study and characterization of different types of materials applied in synthesis, restauration and conservation of Cultural Heritage, both ancient and modern. Thus, in collaboration with the IETCC, we are working on the synthesis of ecocements with application in 3D printers using construction and demolition waste (CDW) and through NMR we have determined the microstructural modifications of these cements. We are collaborating with the European project Innovaconcrete in the study of the effect of new generation additives on the microstructure of the restoration materials of modern constructions. With respect to the study of ancient restoration materials, and in collaboration with the PUCMM University of the Dominican Republic, the original pigments used in one of the chapels of the Primada de Santo Domingo Cathedral have been studied by means of in situ Raman spectroscopy, establishing that these pigments probably came from autochthonous materials.

## 2B.3. MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

### RESEARCH LINES:

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

### RESEARCH SUBLINES:

- Astrophysical ices.
- Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance.
- Generation, processing and study of interstellar dust analogs.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Crystalization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- Spectroscopic parameters of molecules of relevance in collisional, atmospheric and combustion processes.
- Atomistic modelling and experimental characterization of secondary uranium oxide phases produced in conditions of storage of spent nuclear fuel.
- Quantum Control of Alignment and Orientation in Isolated Molecules and Ultracold Dipolar Gases.

### EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible and millimetric emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear and non-Linear (Stimulated) Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics.
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy.

### RESEARCH ACTIVITY:

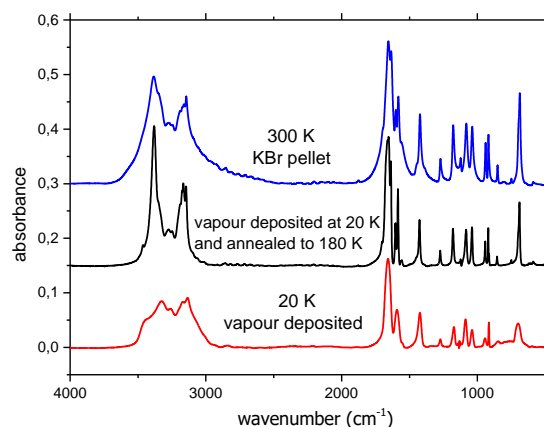
#### MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

##### Astrophysical ices.

Diffusion coefficients of CH<sub>4</sub> on amorphous solid water (ASW) have been determined for temperatures ranging from 42 K to 60 K. The combination of experiments performed at IEM, based on IR spectroscopy, with those performed at the Esc. Politec. Alcoy (Prof. M.A. Satorre's group, coordinated MINICO Project), based on a cryogenic quartz crystal microbalance, allowed the study of ices with different morphologies and its effect on diffusion. In collaboration with Stephanie Cazaux (T. U. Delft), the macroscopic diffusion coefficients obtained experimentally have been compared with those necessary to describe diffusion in these system in the microscopic scale via Monte Carlo simulations. This work has been published in Astronomy and Astrophysics.

Continuing with the CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>O ices, the IR spectrum of ASW layers with some molecules adsorbed on top have been simulated using the module CASTEP from Materials Studio. The simulations reproduced successfully the experimental observations of frequency shifts and intensity enhancements of dangling bond bands of ASW when interacting with CH<sub>4</sub> molecules. This work, done in collaboration with R. Escribano and M. A. Satorre, has been submitted for publication in the Physical Chemistry Chemical Physics.

Finally, in collaboration with researches of the Centro de Astrobiología, CAB-INTA-CSIC, a study of 2-aminooxazole in astrophysical environments has been performed. It was predicted that this species is involved in RNA formation, and therefore its detection in the interstellar medium could give important clues about prebiotic chemistry. Infrared spectra at low temperature of 2-aminooxazole, alone and mixed with water, as well as destruction cross sections by both UV radiation and cosmic rays have been obtained. This work has been accepted for publication in *The Astrophysical Journal*, where it will appear at the beginning of 2021.



IR spectra of 2-aminooxazole vapour deposited at 20K (red) and annealed to 180 K (black) in comparison with the IR spectrum of a 2-aminooxazole KBr pellet (blue).

### Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance.

Under the european project Nanocosmos, in colaboración with the ICMC of CSIC it has been posible to prove the aliphatic nature of analogs of nanoparticles formed in circumstellar regions of evolved stars, and their further transformation in aromatic material by heating. It has been done by means of experimental studies performed in the ultra high vacuum facility Stardust. Optical emission measurements of the plasmas generated by sputtering of a graphite target in mixtures of Ar with traces of H<sub>2</sub> have allowed the identificatoion of the radicals involved in the early stages of nanoparticle formation. Similar experiments with trazes of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> instead H<sub>2</sub> haved shed light on the chemistry in gas phase of acetilene in C-rich circumstellar envelopes. These studies have been published in *Nature Astrónomy* and *The Astrophysical Journal*, respectively (see the Publications section below). Other studies on the effect of H<sub>2</sub> in plasmas generated by sputtering on a Si target have been concluded too and accepted in 2020 to be published soon.

### Reaction dynamics.

We have addressed the study of stereodynamical effects on the shape (orbiting) resonances of the prototypic F+HD ( $v=0,1$ ;  $j=0,1$ ) reaction at very low collision energies ( $< 2$  meV). As a relevant result, we have found that for rotationally excited molecules ( $j=1$ ), the reaction favors an orientation of the internuclear axis perpendicular to that of the initial relative velocity (i.e. side-on collisions). This work has been carried out within the framework of the Unidad Asociada between CSIC and UCM.

### Infrared spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.

We carry on the study of molecular ions of astrophysical interest. In collaboration with the University of Cologne (S. Schlemmer, O. Asvany and T. Salomon), we have measured for the first time in the laboratory, vibration-rotation transitions of the He-CH<sup>+</sup> complex, relevant for the study of the collisions between both species in space. For that purpose we have used the technique of infrared photo dissociation. The ion ensemble is trapped at 4K and irradiated by an infrared OPO, leading to excitation upon resonance and subsequent destruction of the complexes (He-CH<sup>+</sup> has a dissociation energy of  $D_0 = 243$  cm<sup>-1</sup>). The photo dissociation spectrum is recorded by counting the number of these complexes as a function of the IR excitation frequency. In that way, the resonant absorption of IR photons is observed as a dip in the counts. We have also measured the rotationally resolved spectrum of the He<sub>4</sub>-CH<sup>+</sup> complex. To the best of our knowledge, He<sub>4</sub>-CH<sup>+</sup> is the largest He<sub>n</sub>-R<sup>+</sup> type complex ( $n=4$ ) for which a rotationally resolved IR spectrum has been reported. It is worth noting that both species exhibit clear rigid rotor spectra, an asymmetric top in the case He-CH<sup>+</sup> (C<sub>s</sub> symmetry with a T-shaped structure) and an oblate symmetric top for He<sub>4</sub>-CH<sup>+</sup> (C<sub>4v</sub> symmetry with four He atoms on a plane perpendicular to the CH<sup>+</sup> moiety), while much more floppy structures could be expected from their weakly bound nature.

### Generation, processing and study of interstellar dust analogs.

Mass spectrometric measurements of ions and neutrals in cold plasmas generated by capacitively coupled RF discharges with mixtures of Ar and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> has allowed to shed light on the initial polymerization processes during the formation of particles of amorphous hydrogenated carbon, with special emphasis on the time evolution of the concentration of anions and cations.



A kinetic model has been developed to simulate the experimental data. The results are being prepared at present for their publication.

## MOLECULAR FLUID DYNAMICS

During 2020 we have continued the quantitative study of out-of-equilibrium gas flows, from energetic conditions. However, the research activity of the group has been seriously hindered by the COVID-19 pandemic, first by the three-month lockdown since mid-March, and later by the attendance limitations imposed in the "new normality" situation. Due to the mainly experimental nature of the group's activity, the limitation of physical presence in the premises has posed an extra difficulty to the planned experiments.

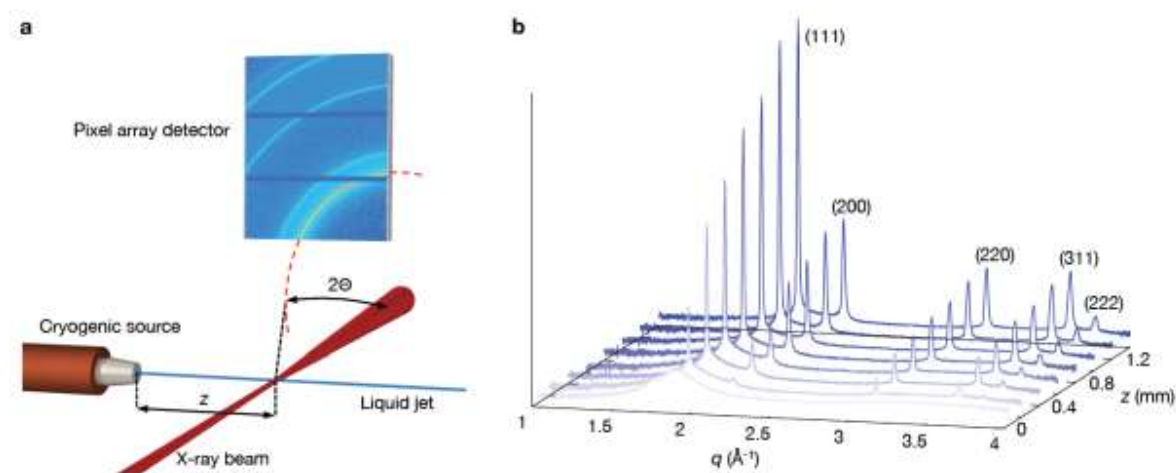
We have finished the analysis of the  $H_2$ :  $H_2$  inelastic collisions in the 20 to 300 K the thermal range. The starting data stem from very accurate measurements of number densities and rotational populations in  $H_2$  supersonic jets, carried out in our laboratory by means of Raman spectroscopy, and from theoretically calculated rate coefficients for inelastic collisions. Subsequently, the analysis has been extended to 1000 K, by extrapolating the experimental collisional rate coefficients by means of the Arrhenius-Kooij equation, and comparing them with new state-of-the-art theoretical calculations by the INTERMOL group at IFF-CSIC. Our results are hoped to be useful to the astrophysical community for the interpretation of a wealth of astronomical infrared spectroscopic data on  $H_2$ .

We have continued with the experiments on the vibrational relaxation of  $CO_2$ , a very important process for the radiative transfer within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars. We have measured the number densities and the rotational and vibrational temperatures in  $CO_2$  jets from nozzles between 400 and 700 K, as well as in the Mach disk shock wave of jets from nozzles at 800 K and at room temperature. From the analysis of these latter experiments, the jump in the vibrational populations at the shock wave has been observed for the first time.

Regarding the instrumental development, the high-temperature nozzle has been redesigned, employing new resistive heating cartridges that will allow it to be heated up to 1100 K. All the needed components are already commissioned and machined, and we expect to install it and test it in the first months of 2021.

On the other hand, we have carried out new tests to produce and stabilize an evaporating water meniscus at low pressure, after installing a controlled fine injection system. The experiments are aimed at measuring the resulting flow field (temperatures and densities) close to the liquid-vapor interface, by Raman spectroscopy. The detailed description of the evaporation process at microscopic scale is not fully understood; in particular, there is no consensus in the community about the observed thermal jump in some experiments.

Finally, in collaboration with the University of Frankfurt (R. Grisenti), and with the department of Macromolecular Physics of IEM-CSIC (T. Ezquerro), the analysis of the crystallization of supercooled liquid filaments of Ar and Kr mixtures has been finished. The measurements of X-ray diffraction were carried out at the DESY synchrotron in Hamburg. From their analysis it has been possible to reconcile the crystallization kinetics of these mixtures with existing crystal growth models by explicitly taking into account the nonideality of the mixtures. Our results highlight the importance of thermodynamic aspects in describing the crystal growth kinetics, what represents a great advance in the understanding of crystallization process, in general, and that of mixtures, in particular.



**Figure a:** Scheme of the experiments on X-ray scattering of liquid microjets

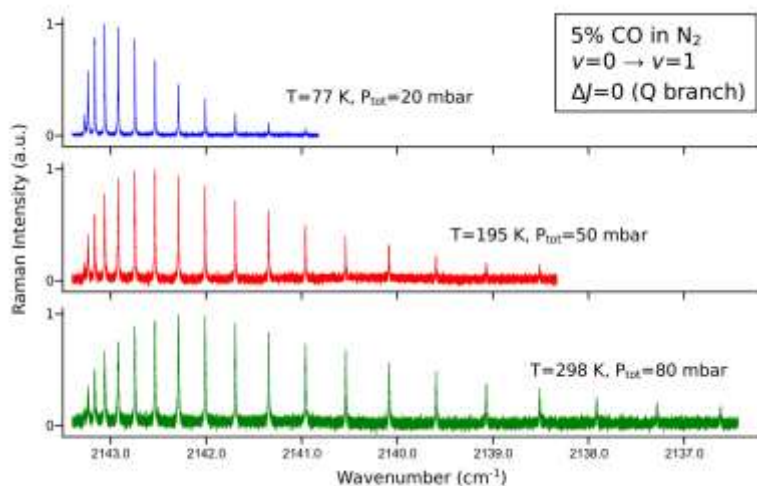
**Figure b:** diffraction profiles for the Ar(15%)+Kr(85%) mixture at different distances from the origin

## LASER SPECTROSCOPY

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

The work carried out in the Laser Spectroscopy Laboratory throughout 2020 has been focused on the experimental study, by means of high resolution nonlinear Raman spectroscopy, of the molecule of CO perturbed by collisions with N<sub>2</sub> (hereafter the CO-N<sub>2</sub> collisional system) for the determination of its pressure broadening coefficients.

The CO-N<sub>2</sub> system is interesting from several points of view: firstly, the molecule of CO appears as a product in numerous combustion processes, especially incomplete combustions, which creates the possibility of using it as a marker for spectroscopic diagnostics of such processes. When these combustion processes take place under atmospheric conditions (i.e. in the presence of air), the molecule of N<sub>2</sub> is the main collisional partner in the medium. Secondly, CO is present in the Earth's atmosphere in very low concentrations, and its role in the atmospheric physics and chemistry is not well known yet. Its concentration shows very strong oscillations, partly due to its short lifetime (2-3 months) under atmospheric conditions and partly to the disperse and discontinuous nature of its sources. This has fuelled the interest in its monitoring by spectroscopic means, both from ground- and satellite-based instruments. Finally, CO is one of the most abundant molecules in the interstellar medium, with its presence having been detected in the atmospheres of all the planets in the solar system — except for Mercury— as well as Titan's.



*Figure: Spectra of the Q branch of Co perturbed by N2 at different temperatures and pressures*

Remote monitoring of the concentrations of CO by spectroscopic means in any of the environments above requires a very detailed prior knowledge of its spectrum and of the changes it experiences in the presence of other species that act as collisional partners, among which the molecule of N<sub>2</sub> is often the most abundant. In this context it is especially important to know how the spectrum changes with pressure and temperature, two variables that can vary dramatically in environments such as planetary atmospheres when the altitude at which measurements are performed changes. Experimentally, this translates into a necessity to measure the collisional broadening coefficients of the CO-N<sub>2</sub> system at different temperatures.

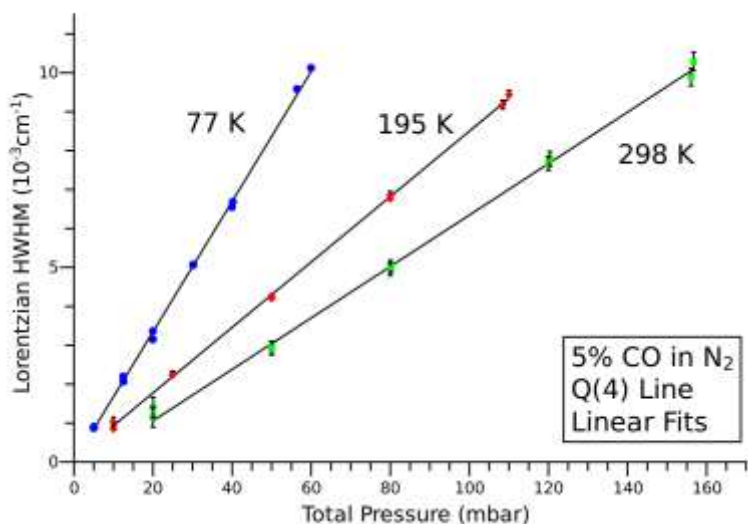


Figure: Obtention of collisional broadening coefficients for Q(4) by linear fit at 3 temperatures

The groundwork for the collisional experiments in the CO-N<sub>2</sub> was already laid out in 2019, when a number of preparatory measurements in pure CO and in CO-N<sub>2</sub> mixtures were performed in order to determine optimum working conditions, speed of gas diffusion in the mixtures and other experimental parameters. Building on these preparations it has been possible to carry out, through the year 2020, systematic measurements in the collisional system at multiple pressures and three reference temperatures, 77, 195 and 298 K. The spectroscopic measurements have been centered on the Q branch of the fundamental vibration ( $\nu=0 \rightarrow \nu=1$ ) of CO. Analysis of these measurements have yielded detailed sets of collisional broadening coefficients for CO-N<sub>2</sub> at each of the three temperatures, comprised of individual values of the coefficients for each rovibrational component Q(J) of the Q branch in the fundamental vibration. Figure 1 shows as an example three spectra of the Q branch of CO recorded at the three reference temperatures and selected pressures. Figure 2 shows as an example three fits of experimental data for the Q(4) rovibrational component of the band at the three temperatures to illustrate the linear behavior of the broadening of the collisional widths of the spectral lines with pressure and its dependence with temperature.

The obtained data are currently being analyzed and compared with those produced, by means of quantum-dynamical calculations, by our collaborator Prof. F. Thibault (University of Rennes). Once the process is finished the results will be published jointly.

## THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

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

Using first principles methods, an unusual property has been studied in zinc and cadmium oxalates, such as their negative linear compressibility as well as their Poisson's ratio, which is indicative of unusual elastic behavior in some oxalates. Likewise, the thermodynamic and elastic properties of uranofilite could be characterized in the study of materials from spent nuclear fuel.

## 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:

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

### 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.
- 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.
- Raman Spectroscopy.
- Neutron Scattering.

- Atomic force (AFM) microscopies.
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Near Edge X-ray Absorption Fine Structure (NEXAFS)
- Resonant Soft X-ray Scattering (RSOXS) Theoretical and mathematical physics.
- Deposition of polymers by Ink-jet

## RESEARCH ACTIVITY:

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

#### NANOSTRUCTURING OF POLYMERIC MATERIALS

##### CONDUCTIVE POLYMERS

Nanostructuring continues being a promising alternative to modify the functionalities of conductive polymer materials with the aim of seeking applications in technologies that include among other organic solar cells, organic field effect transistors and organic light-emitting diodes. We have demonstrated that laser-induced periodic surface structures can be formed by laser irradiation techniques in thin films of poly (3,4-ethylenedioxythiophene) complexed with poly (styrene sulfonate) (PEDOT: PSS) deposited on indium tin oxide. . The morphology has been characterized by atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence small angle X-ray scattering (GISAXS). The crystal structure of the polymeric film was studied by Grazing Incidence Wide Angle X-ray scattering (GIWAXS) and Raman spectroscopy. The electrical properties of PEDOT: PSS, as assessed by conductive AFM (C-AFM), have been shown to be maintained after the laser irradiation process. These results may be of interest to achieve conductive polymeric nanostructures without using clean room conditions.

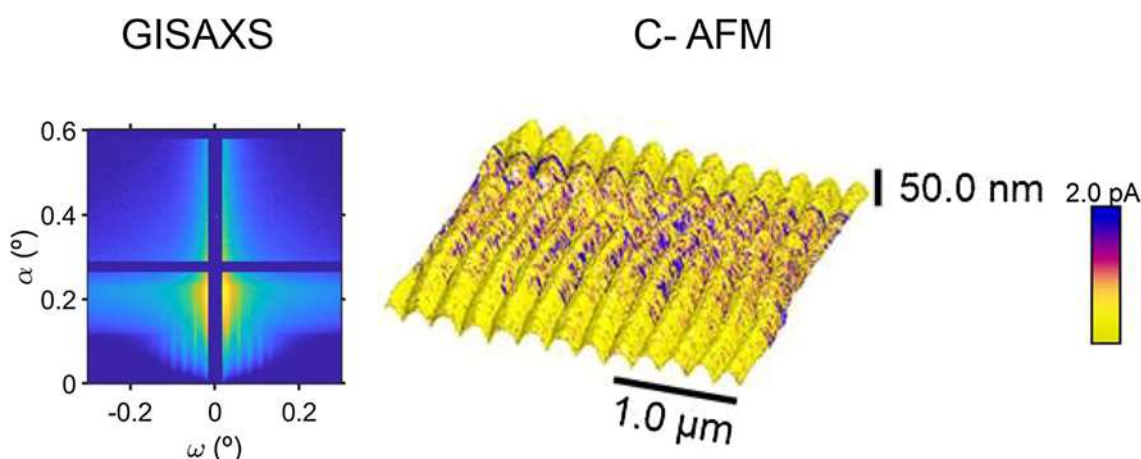


Figure 1. Combination of Grazing Incidence Small Angle X-ray scattering (GISAXS) and conductive AFM (C-AFM) experiments have made it possible to investigate nanostructuring using laser irradiation techniques of the conductive polymer PEDOT:PSS.

##### BLOCK COPOLYMERS

In collaboration with a group from the Barcelona Institute of Microelectronics (IMB-CSIC), the parameters governing the self-assembly kinetics of block copolymers under both isothermal and non-isothermal processing conditions have been investigated in detail using Grazing Incidence Small Angle X-ray scattering (GISAXS). A novel methodology has been developed to describe the self-assembly and its evolution with thermal processing conditions. Such a model allows analyzing conventional processes under isothermal annealing conditions and extends to the more realistic case of non-isothermal annealing. This analysis may be crucial for the prediction of the most efficient conditions for the formation of nano and microstructures free of defects of interest in nanotechnology and microelectronics.

#### RELATIONSHIP BETWEEN STRUCTURE AND PROPERTIES IN BIODEGRADABLE POLYMERS FOR A CIRCULAR ECONOMY

Among the various factors that contribute to the transition from a linear to a circular economy, the identification of "superpolymers" with excellent mechanical strength and barrier properties and zero environmental impact has become a challenge. These new "supermaterials" make recycling a concrete option for the efficient and ecological management of plastic waste. Unexpected and surprising properties have been explained based on the presence of a 2D microstructure characterized by partially ordered furan rings favored by intermolecular hydrogen bonds. In collaboration with the Department of Chemistry, Environment and Materials Engineering of the University of Bologna, we have continued

researching 100% biodegradable polyesters that have exceptional mechanical and barrier properties to gases such as O<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub>. In particular, four fully biobased homopolyesters of high molecular weight 2,5-furandicarboxylic acid (2,5-FDCA) have been successfully synthesized by two-step melt polycondensation from 2,5-FDCA dimethyl ester and glycols of different lengths (the number of methylene groups ranged from 3 to 6). From X-ray scattering experiments using synchrotron radiation, it was possible to demonstrate the existence of a characterized mesophase of low structural order (one-dimensional or two-dimensional), in all the samples under study, its fraction being strictly related to the length of the subunit. glycol. This mesophase, together with the amorphous phase and the crystalline phase eventually present, directly affects the mechanical and barrier properties, being noteworthy that the polymer with the highest mesophase fraction is the one with the best gas barrier properties.

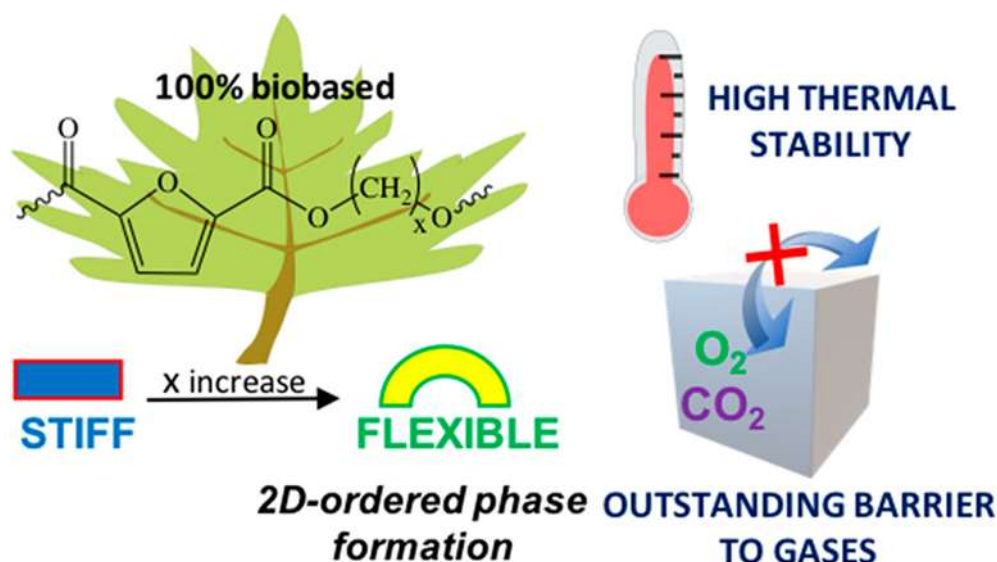


Figure 2. The transition towards a circular economy forces the search for new 100% biodegradable polymers with excellent mechanical resistance and barrier properties against gases and zero environmental impact.

### BIOBLOCK COPOLYMERS BASED ON PCL, PTT AND PBF

The decrease in resources from fossil fuels, the increase in the price of oil, the emission of greenhouse gases in standard methods of production of plastics, as well as the limited biodegradability of these materials, is driving the development of what are known as “biopolymers” or “bioplastics”. These are polymers derived from renewable natural resources or biodegradable polymers. In this sense, the polycaprolactone (PCL) is an aliphatic polyester that deserves special attention. It is particularly interesting because of its properties such as excellent water resistance, biocompatibility, and very high flexibility. However, it exhibits poor thermal and mechanical properties. In order to improve the properties of PCL and expand its applications, copolymerization or blending techniques have been applied. Therefore, block copolymers based on PCL, poly(1,3-propylene terephthalate) (PTT) and poly(butylene 2,5-furan dicarboxylate) (PBF) has been synthesized, at different compositions. PTT, an aromatic semicrystalline thermoplastic, is one of the most important commercial polyester because of its good mechanical and thermophysical behavior. PBF is 100% biobased and recyclable polymer derived from plants that offer outstanding gas barrier and mechanical properties. Subsequently, we are studying their mechanical, thermal and dielectric properties. This research is carried out in collaboration with a group from the West Pomeranian University of Technology of Szczecin (Poland).

### VIRUCIDAL SURFACES AND DENDRIMERS

The present emergency situation generated by the pandemic associated with the SARS-CoV-2 virus has highlighted the need for contention measures as a complement to the crucial measures of diagnosis, treatment and cure of the disease. Although in the case of SARS-CoV-2 we now know, after several months of the pandemic, that contagion occurs primarily by air, the mitigation of pathogen spreading through surfaces in highly contaminated areas, like health centers, can be essential, both in the recent pandemic situation as well as to face possible future biological threats. In addition to the economic damage to health systems, according to data from the WHO, (World Health Organization) nosocomial infections are responsible for serious public health problems. In collaboration with groups from the Barcelona Institute of Microelectronics, the Institute of Polymer Science and Technology, the Institute of Advanced Chemistry of Catalonia, the Complutense University of Madrid, the Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology, launched several research initiatives aimed at the manufacture of this type of surfaces. Related to this area, we have started to work, in collaboration with a group from Universidad de Alcalá, on understanding the structure of dendrimers in solution by small angle X ray scattering. Dendrimers are monodispersed macromolecules with well-defined size and structure and a multivalent molecular surface. These characteristics make them very attractive for biomedical studies. These applications depend mainly in the type of functional

group. For example, in the case of peripheral cationic groups, polycationic dendrimers have been explored as gene and drug carriers or as antibacterials. If the functional groups are anionic, this type of dendrimers has been tested as antivirals. The experiments have been carried out at ALBA synchrotron.

## **Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS**

### **GENERAL ASPECTS OF THE RESEARCH**

Due to the special circumstances caused by the pandemic, the research work of our group has undergone important changes with respect to its normal activity. It should especially be noted that the decrease in face-to-face contact has weakened the cohesion of the group's research activity and especially the discussion of scientific results. Of course the experimental research has been conditioned to the periods of activity in which it was possible to be present at the laboratories in safe conditions.

Despite this, experimental results have been obtained in the project on the study of treatments for metastatic breast cancer with monoclonal antibodies that is carried out under a contract with the Vald'Hebrón Hospital Foundation and start the experimental and simulation activity in the project "Eco-design of containers based on conventional polymers through validated multiscale modeling" granted by the MCINN in the middle of the year.

Most important our group wanted to join the Institution's call at the end of March to contribute to the extent of the groups' capacities in the fight against the pandemic generated by SARS-CoV-2. This is how we designed a research project with an exclusively computational methodology and with the particularity of requesting the intervention of citizens through the Boinc platform managed by Ibercivis. Our previous knowledge in the area of proteins facilitated this participation in the area of drug-protein interactions. Thus, at the end of March, a series of contacts began with the technical managers of Ibercivis and finally the "COVID-PHYM" project was launched on April 24, 2020, after its approval by the VICYT.

Also noteworthy is the activity carried out in collaboration with researchers from the UAH and INTA as of 2019 and the results of which have been partially published this past year.

The activities and main results obtained in the different projects are described below.

### **COVID-PHYM PROJECT**

#### ***Brief timeline of the project***

Contacts with Ibercivis researchers begin at the end of March and a scientific project is developed by our group that can be carried out with the help of the BOINC platform administered by Ibercivis. It should be noted that we had already had previous collaborations with Ibercivis a few years ago. After several technical meetings, which are outlined in the corresponding section of this report, the project is finally launched on April 24, 2020 by means of a CSIC press release (see details on the group's website)

Scientific objective of the project:

#### ***"In-silico" study of SARS-CoV-2 RNA polymerase nsp12 inhibitors***

On the basis that the 3D structure of RNA polymerase has been elucidated recently and this protein being a key component for RNA replication and transcription, it forms a "target" for the development of antivirals. It is proposed to test different antivirals already used in other diseases such as Remdesivir for Ebola, Favipiravir for influenza and yellow fever among others, Tenofovir for HIV and Emtricitabine for HIV.

The scientific project in summary covers the following points:

1. Identification of active centers of inhibition in RNA polymerase.
2. "Docking" of the ligands mentioned in the receptor
3. Refinement of Ligand-Receptor interactions, using techniques such as MD, "Free energy perturbation" and QM / MM.
4. Creation of different pharmacophores of the aforementioned ligands and search in databases such as ZINC, in search of potential inhibitors based on the characteristics of the four ligands.
5. "Docking" of potential inhibitors
6. Refinement of Ligand-Receptor interactions of the most promising potential inhibitors.

Throughout 2020 the project has led to the following concrete results:

#### ***Coupling of remdesivir and tenofovir at the active site of SARS-CoV-2 RNA polymerase including growing and patterning RNA strands (analysis of results in collaboration with***

The repositioning of remdesivir and tenofovir against Covid-19 has only shown partial evidence of improving therapeutic outcomes in clinical trials and observational studies, respectively. The reason behind this effectiveness remains unknown. In this study, we developed an in-silico molecular docking approach for the active triphosphate forms of both antivirals with SARS-CoV-2 polymerase and the RNA chain complex, under the hypothesis that clinical observation could be based on the specificities of the drug-protein interaction. Our model has allowed the precise reconstruction of the molecular interactions between remdesivir and the receptor, which has a slightly higher affinity than the natural ligand ATP. We further observed a

set of characteristics of the receptor-tenofovir complex that suggest a functional but suboptimal interaction, probably resulting in limited viral inhibition in the absence of a high intracellular concentration in the target tissues. Our findings provide an argument for the mixed efficacy of tenofovir-based compounds against SARS-CoV-2 and highlight the relevance of the intracellular availability of the nucleotide analog to viral tropism.

### **PROJECT "ECO-DESIGN OF PACKAGING COMMODITY POLYMERS BY VALIDATED MULTISCALE MODELLING"**

The main objective of this project is to establish a multiscale modeling protocol that describes the different interactions of polymers that are generally found in multilayer materials. For this, a bottom-up integration of computational methods that work at different spatio-temporal scales is proposed. In parallel, specific experiments are proposed to verify and validate the computational models.

Specific software is being developed to calculate the interaction parameters of monomers, based on the calculation of energies from the density functional theory (DFT) in order to determine the affinity and interaction of the polymeric segments at the atomistic level. On the other hand, the experimental determination of the strength of the interaction between the polymeric species is being carried out through experiments of depression of the melting temperature and infrared spectroscopy (FTIR). Remarkable differences in the strength of the interaction have been found in the different binary mixtures explored so far. These preliminary results will allow us to select the most promising materials for future studies on morphology, rheology and structure of the processed mixtures.

#### ***Computer simulation of the effect of temperature on the dimensions in the melt of the chain of randomly branched polyethylene with short chains***

As part of this project, the analysis and behavior of branched PE, the main component of multilayers, has continued along the year. In this sense, the results of the chain conformations obtained by simulations of molecular dynamics at different temperatures in a series of ethylene / 1-butene copolymers have been analyzed. We have obtained that the invariant relationship  $\langle Rg^2 \rangle / M$  decreases with increasing concentration of ethyl branches and that  $\chi$  changes from negative to positive values at a concentration of branches. Thus, it is shown that there is a strong influence of the number of side groups with the different population of trans / gauche states of the main chain as the temperature varies. This behavior has not been explained before either theoretically or by computer simulation. These results will help us to determine which type of PE is the most suitable as a component of multilayers.

#### ***Micro-rheology of polymers in solution: implementation of a valid method to determine the interactions between the components***

This aspect of the research is also important in order to establish a good methodology that helps us to accurately characterize the different interactions between the constituent polymers of the multilayers.

In this sense, the study that had been carried out on the diffusion of nanoparticles of different functionality in aqueous solutions of polyethylene oxide has been completed. The final results show the formation of an adsorbed PEO layer on the carboxylate modified polystyrene particles. Furthermore, this layer causes diffusion to be slower than that corresponding to non-functionalized particles, in correspondence with the increase in size. The interaction between the surface of the carboxylate-modified particle and the PEO macromolecules has been confirmed by computational simulations at the atomistic level (Figure 3). The grafted acrylate copolymers that functionalize the surface of the nanoparticles, give them a hydrophobic surface.

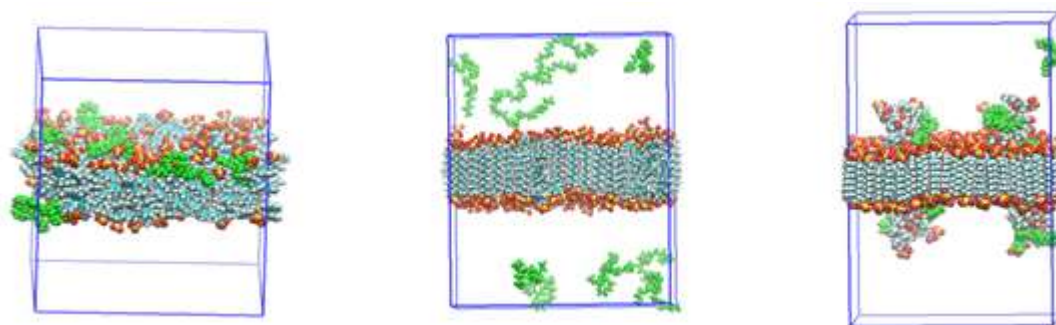


Figure 3. Representation of the simulation box for different nanoparticle segments, including the interaction with PEO molecules (after 400 ns of NPT dynamics).

### **PROJECT ON STUDY OF THE INTERACTION OF HER2-BIOSIMILARS**

The HER2 membrane receptors are involved in the growth, division and repair processes of mammary cells. However, in almost 20% of breast cancers, the gene that expresses HER2 does not work properly and develops excessive copies of itself, causing an overexpression of the HER2 protein. This causes cells to grow unrestricted and uncontrolled. In recent years, successful monoclonal antibody (mAb) -based breast cancer therapies have been developed. Specifically, Herceptin and Pertuzumab are being used in a combination therapy. At the same time, the pharmaceutical industries have been developing biosimilars of Herceptin. In fact, biosimilars are of great interest today, being biological substances with a high similarity in



structure, biological activity and immunogenicity profile with another biological medicine already approved and which must meet the same quality, safety and efficacy requirements. However, biosimilars can present variability, mainly due to a manufacturing process, much more complex than that of conventional medicines. Variability can affect not only structural properties and biological activity, but also basic biophysical properties. Therefore, the determination of hydrodynamic properties such as diffusion coefficient and size, along with physical characteristics such as molecular weight and electrophoretic mobility (electrical charge), are essential in formulations of biosimilar therapeutic mAbs.

In our group, the properties of different biosimilars are being explored, as well as their association with the extracellular domain of the HER2 receptor, in collaboration with the Val d'Hebron Hospital. The determination of the hydrodynamic properties at different concentrations has given access to important properties such as the second virial coefficient (B<sub>2</sub>), the diffusion interaction parameter (kD), the UV absorption coefficient (dA / dc) and the net charge of protein (Z), directly linked to the stability and specific amino acid sequence of biosimilars. Using a combination of hydrodynamic and electrophoretic experimental techniques, and multiscale simulation protocols, an attempt is also made to describe the structural and dynamic behavior of HER2-Biosimilar complexes in aqueous solution under physiological conditions. The objective is to establish the similarities or differences between the complexes that can be obtained between different biosimilars and the HER2 protein.

## COLLABORATIONS WITH OTHER RESEARCH GROUPS

***With the Department of Organic and Inorganic Chemistry of the University of Alcalá de Henares, the rheological and morphological properties of certain biodegradable polymers are investigated.***

In this collaboration we investigated an interesting approach that allows the controlled polymerization of the two functional groups present in glycidyl methacrylate (GMA) to originate macromolecular architectures with novel properties. GMA is an interesting and very valuable monomer as a precursor for polymers and copolymers in advanced applications, among which the synthesis of biodegradable copolymers and the development of drug carriers, genes (therapeutic) or diagnostic agents, biosensors and stabilizers and immobilizers stand out. of enzymes. The material obtained shows very suggestive properties, such as the total absence of crystallinity and a low value of the glass transition. The rheological properties obtained in these materials also suggest a total absence of entanglements, which implies a special macromolecular topology. These and other properties are currently under intense investigation, given the implications derived from them in terms of processing and possible applications.

***With the CSIC-INTA Astrobiology Center we collaborate on the rheological study of Extremophilic biofilms in Rio Tinto.***

Research has been carried out on the characterization of the rheological properties of biofilms of different microorganisms. Preliminary results point to a characteristic relationship between the microstructure observed by LTSEM and the rheological properties. The most striking behavior refers to that observed in extremely mobile microorganisms. These systems show a very characteristic dilating behavior under shear that probably helps to preserve the structural entity of the biofilms under external stresses.

***With the Departement of microbiology of the University of Granada we collaborate on the exploration of the mechanism of action of the antimicrobial peptide AS-48.***

We have proposed an antimicrobial mechanism of action for the circular AS-48 bacteriocin based on experimental observations and molecular dynamics simulations at atomistic detail. The information obtained from those simulations supports a mechanism based on the continuous surface tension exerted by the bound bacteriocin on the bacterial cytoplasmic membrane. That surface tension allows defects formation on the membrane that ultimately drives to pore formation and membrane leakage. In addition, thanks to the atomistic detail given by the simulations, it was possible to assign the role of the different bacteriocin aminoacid types on the membrane wreckage process.

**Capítulo 3**  
**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN**

*Chapter 3*  
*RESEARCH PROJECTS*

### 3.1 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

#### **Métodos de pocos y muchos cuerpos aplicados al estudio de núcleos exóticos**

*Code or Reference:* PGC2018-093636-B-I00

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researchers:* Pedro Sarriguren and Eduardo Garrido

*Duration:* January 2019-December 2022

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

#### **Campos cuánticos y gravitación: simetría cuántica, mecánica estadística y combinatoria**

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

*Funding Institution:* MINECO

*Main Researcher:* Jesús Salas Martínez and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor (Univ. Carlos III)/Participation: Jesús Fernando Barbero González

*Duration:* January 2018-December 2020 (extended until September 2021)

*Objectives:* Study different aspects of quantum gravity with special emphasis in the possibility of using multidisciplinary methods to approach the important problems from novel perspectives.

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

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

*Funding Institution:* MICINN

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

*Duration:* January 2018-December 2020

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

#### **Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)**

*Code or Reference:* H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081

*Funding Institution:* European Commission

*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez

*Duration:* April 2020-April 2024

*Objectives:* Collaborative study of pollutants: identification, reactivity and capture. ATMOS represents a network of 11 institutions.

#### **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.

#### **Contaminantes y gases de efecto invernadero en la atmósfera - estudio de las interacciones gas-gas y gas-sólido para una atmósfera más limpia**

*Code or Reference:* EIN2019-103072

*Funding Institution:* MINECO

*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez

*Duration:* June 2018-June 2021

*Objectives:* Scientific preparation of the ATMOS network.

#### **Theoretical study of the spectroscopy and reactivity of neutral organic species and organic radicals of astrophysical and atmospheric interest**

*Code or Reference:* COOPB20364

*Funding Institution:* CSIC

*Main Researcher:* María Luisa Senent Diez

*Duration:* January 2019-December 2021

**Dinámica, topología e integrabilidad en sistemas cuánticos de muchos cuerpos***Code or Reference:* PGC2018-094180-B-I00*Funding Institution:* MICINN*Main Researcher:* Rafael Alejandro Molina Fernández*Duration:* January 2019-December 2022*Objectives:* Study the dynamics of quantum many body systems with focus on topological quantum phases and integrable models.**QUITEMAD Quantum Information and Technologies in Madrid***Code or Reference:* S2018/TC-43-42*Funding Institution:* Comunidad de Madrid*Main Researcher:* Miguel Ángel Martín Delgado (UCM)/Participation: Jorge Dukelsky and Rafael Alejandro Molina Fernández*Duration:* January 2019-December 2022*Objectives:* Quantum Information and Quantum Technologies

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

**Protontherapy and nuclear techniques for oncology***Code or Reference:* B2017/BMD-3888*Funding Institution:* Comunidad de Madrid*Main Researcher:* María José García Borge*Duration:* January 2018-December 2021*Objectives:* Development of detectors for dose verification.**HIFI, Un espectrómetro para el estudio de reacciones nucleares en HIE-ISOLDE***Code or Reference:* FPA2017-87568-P*Funding Institution:* AEI*Main Researcher:* María José García Borge*Duration:* January 2018 - December 2020*Objectives:* The main objective of this project is to provide HIE-ISOLDE with a spectrometer for nuclear reaction studies. The existence of the spectrometer will open the field of transfer reactions to the inclusion of those with neutrons in the outer channel as well as other transfer reaction in inverse kinematics. A spectrometer is mandatory to do deep inelastic reactions of great interest for spectroscopy studies of neutron-rich nuclei near  $^{78}\text{Ni}$  and for fusion-evaporation reactions possible with the intensity upgrade of ISOLDE. My second objective is to boost the reaction studies in the Nuclear physics line of CMAM. The  $(p,\alpha)$  reactions of astrophysical interest will be the first step in particular the  $^{19}\text{F}(p,\alpha)^{16}\text{O}$ . Third objective is the proactive participation in the local organization of the EMIS Conference at CERN that I promoted and that it will take place from 16<sup>th</sup> to 21<sup>st</sup> of September 2018.**Combined plasmonic and microfluidic technology for enhanced pesticide detection***Code or Reference:* COOPB20373*Funding Institution:* CSIC*Main Researcher:* Santiago Sánchez Cortés*Duration:* January 2019-December 2020*Objectives:* Detection of pollutants by a combination of a Surface-enhanced Raman scattering effect and a flux control mediated by a microfluidic device in suspension.**Nanosistemas plasmónicos orientados a la detección molecular avanzada, biodiagnos y la teranóstica***Code or Reference:* FIS2017-84318-R*Funding Institution:* MINECO*Main Researcher:* Santiago Sánchez Cortés*Duration:* January 2018-December 2020*Objectives:* Fabrication, characterization and functionalization of metal plasmon nanoparticles with advanced technologies to be applied in the molecular detection of drugs, biomolecules and materials with interest in the Cultural Heritage.

**Estudios Experimentales de la Estructura Nuclear Exótica**

*Code or Reference:* FPA2015-64969-P

*Funding Institution:* MINECO

*Main Researcher:* Olof Tengblad

*Duration:* January 2016-June 2020

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

**European Nuclear Science and Application Research 2**

*Code or Reference:* 654002

*Funding Institution:* Comisión Europea

*Main Researcher:* Olof Tengblad

*Duration:* March 2016-September 2021

*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.

**Dinamica y Estructura de Nucleos Exoticos Estudiados en Experimentos**

*Code or Reference:* PID2019-104390GB-I00

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researcher:* Olof Tengblad

*Duration:* July 2020-June 2023

*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.

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

*Code or Reference:* MAT2016-75354-P

*Funding Institution:* MINECO

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

*Duration:* January 2017-December 2020

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

**Estudios experimentales y teóricos de la estructura de núcleos exóticos**

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

*Funding Institution:* MINECO

*Main Researchers:* Andrea Jungclaus, J. Luis Egidio

*Duration:* January 2018-December 2020

*Objectives:* The experimental and theoretical study of the structure of exotic nuclei. The experimental work is mainly employing the technique of gamma-ray spectroscopy while the theoretical studies are based on the beyond mean field approach.

**Óptica de Luz Magneto-Eléctrica en Medios Nanoestructurados Dieléctricos (MELODIA)**

*Code or Reference:* PGC2018-095777-B-C21

*Funding Institution:* MICIU

*Main Researchers:* Vincenzo Giannini y José A. Sánchez Gil

*Coordinator:* José A. Sánchez Gil

*Duration:* January 2019-December 2021

*Objectives:* The aim of the present proposal is the development (on the basis of the previously acquired experience and knowledge) of new theories, conceptual models, and computational tools able to explain and understand the rich phenomenology that emerges from state-of-the-art research areas such as the interaction of light with nano-structures exhibiting magneto-optical or magneto-electric responses. These subject matters are nowadays in the forefront of Physics and Optics/Photonics.

**Topological Nanophotonics (NANOTOPO)**

*Code or Reference:* EXPLORA: FIS2017-91413-EXP

*Funding Institution:* MINECO

*Main Researcher:* Vincenzo Giannini

*Duration:* November 2018-October 2020

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

**Escape room “Del cosmos al nano... y más allá”***Code or Reference:* FGCC-2020-0016*Funding Institution:* FGCSIC*Main Researcher:* Sagrario Martínez Ramírez*Duration:* January 2020-December 2020*Objectives:* Escape room for students aged 17-20 to learn dimensions from the smallest (nanometres) to the largest (light-year).**Tecnologías en Ciencias del Patrimonio***Code or Reference:* P2018/NMT-4372*Funding Institution:* Comunidad de Madrid*Main Researcher:* Rafael Fort*Duration:* January 2019-December 2021*Objectives:* Investigate the conservation of cultural heritage with a scientific and technological perspective, oriented towards the transfer of results to the involved sectors, industry, citizenship and heritage conservation agents, favoring the tourism industry.**Innovative circular ultralightweight cement mortar containing inorganic recycled building materials for the manufacturing of topologically optimized 3D printing architectural products. (CUCEM3D)***Code or Reference:* RTI2018-097074-B-C21*Funding Institution:* MINECO*Main Researcher:* Moisés Frías Rojas*Duration:* January 2019-December 2021*Objectives:* To set the scientific & technological basis for the synthesis and performance study of novel eco-hybrid cement-based mortar formulations containing inorganic recycled building materials and circular lightweight aggregates for the manufacturing of topological optimized 3D printable architectural elements.**Programa Ramon y Cajal 2017-Física y Ciencias del Espacio***Code or Reference:* RYC2017-22007*Funding Institution:* MICIU*Main Researcher:* Kathrin Wimmer*Duration:* June 2018-May 2024**DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei***Reference:* 2019-T1/TIC-13194*Funding Institution:* Comunidad de Madrid*Main Researcher:* Christophe Rappold*Duration:* March 2020-February 2022.*Objectives:* Study of exotic hypernuclei in high energy nuclear collisions. Development of machine and deep learning techniques for improving the experimental spectroscopy of hypernuclei.**PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES****Análisis Químico y Mineralógico de Muestras del Proyecto ACROFA***Funding Institution:* PUCMM*Main Researcher:* Sagrario Martínez Ramírez*Duration:* 1 month (January 2020)*Objectives:* Characterization of pigments from spectroscopic techniques.**Caracterización mineralógica de las Pinturas de la Verja del Cuartel General del Ejército***Funding Institution:* Taller de Restauración El Barco SL*Main Researcher:* Sagrario Martínez Ramírez*Duration:* 1 month (February 2020)*Objectives:* *In situ* characterization of pigments.

### 3.3 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

#### MOLECULAR PHYSICS

#### **Gas and Dust from the Stars to the Laboratory: Exploring the NanoCosmos**

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

*Funding Institution:* EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS

*Main Researcher and coordinator:* José Cernicharo Quintanilla

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

*Duration:* August 2014-July 2020 (extended until July 2021)

*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.

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

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

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

*Main Researcher:* José M<sup>a</sup> Fernández Sánchez and Salvador Montero Martín

*Duration:* January 2018-June 2021

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

#### **Hielo, gas y polvo en astrofísica de laboratorio**

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

*Funding Institution:* MINECO. **FEDER**

*Main Researchers:* María Belén Maté and Isabel Tanarro.

*Duration:* December 2016-December 2020 (extended until May 2021)

*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.

#### **ATMOS. Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere**

*Code or Reference:* H2020-MSCA-RISE-2019-87208

*Funding Institution:* EUROPEAN COMMISSION. Horizon 2020 Research and Innovation Framework Programme

*Main Researcher:* M<sup>a</sup> Luisa Senent Díez

*Duration:* April 2020-April 2023

*Objectives:* Collaborative effort on scientific problems related to atmosphere pollution elements, with an emphasis on training graduated students in atmospheric sciences, in state-of-the art experimental and theoretical studies of gas phase molecular systems, and their interactions with solids.

### 3.4 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

#### MACROMOLECULAR PHYSICS

#### **Multidimensional micro and nano structuring of polymer materials by advanced technologies: from the fundamentals to the applications. (MULTIMATPOL)**

*Funding Institution:* MICINN

*Main Researchers:* Aurora Nogales/Tiberio A Ezquerra

*Duration:* June 2020-May 2023

*Objectives:* Design of new structures at the nano and the microscale in polymer surfaces and bulk for applications in the field of renewable energies and sustainable plastics.

**Proyecto Covid-Phym: Estudio “in-silico” de inhibidores de la SARS-CoV-2 ARN polimerasa nsp12**

Funding Institution: CSIC/Fundación Ibercivis

Main Researchers: Javier Martínez de Salazar/Javier Ramos

Other Participants: Víctor Cruz; Francisco Sanz and Daniel Lisbona (Fundación Ibercivis); Pablo M de Salazar (Universidad de Harvard); Jaime Pérez and Eduardo Actis (VACC)

Duration: 1st April 2020 – till date

Budget: non evaluable

Objectives: On the basis that the 3D structure of RNA polymerase has been elucidated recently and this protein being a key component for RNA replication and transcription, it forms a “target” for the development of antivirals. It is proposed to test different antivirals already used in other diseases such as Remdesivir for Ebola, Favipiravir for influenza and yellow fever among others, Tenofovir for HIV and Emtricitabine for HIV.

**TeatrIEM: “La escena de Anaximandro: encuentros de Teatro y Ciencia”**

Code of reference: FGCC-2020-0008

Funding Institution: FGCC

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez

Duration: January 2020-December 2021

Objectives: The main objective of this project is to support the scientific theater group TeatrIEM aimed at improving the dissemination of science and raise awareness about the ethics of scientific research.

**“Ciencia en abierto con TeatrIEM: Del certamen a la representación”**

Code of reference: FCT-19-14427

Funding Institution: FECYT

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez

Duration: June 2020-September 2021

Objectives: The main objective of this project is to support the scientific theater group TeatrIEM with the aim of improving the dissemination of science and attracting the interest of students towards a scientific career.

**Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling. (EcoPOL)**

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: Javier Ramos/Juan Francisco Vega

Other Participants: J. Martínez-Salazar, Víctor L. Cruz and Virginia Souza-Egipsy

Duration: June 2020-May 2023

Budget: 72.5 k€

Objectives: The ultimate goal of this project is the understanding of the interactions between the polymeric components usually found in multilayer films used in packaging by means of the multiscale modeling at different length-time scales.

**PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES****Estudios de la formación de complejos en disolución entre el dominio extracelular HER2 y anticuerpos monoclonales de relevancia en el cáncer de mama**

Code or Reference: Research Agreement N° 20196519

Company: Fundación Instituto de Investigación Oncológica Vall d’Hebron

Main Researcher: Javier Martínez-Salazar

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

Duration: December 2019-May 2021

Budget: 37.5 k€

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

**On the effect of long chain branching on rheological properties of polyethylene**

Code or Reference: Research Agreement N° 20205681

Company: Total SE (France)

Main Researcher: Juan Francisco Vega

Duration: November 2020-March 2022

Budget: 67.9 k€

Objectives: Rheological characterization of polymeric samples.



**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

**VIII Tux Workshop on Quantum Gravity** (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 10<sup>th</sup>-14<sup>th</sup> of February 2020.

- *Asymptotic Hamiltonian Diagonalization in Hybrid Quantum Cosmology* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Beatriz Elizaga Navascués.
- *Unique Fermionic Vacuum in de Sitter Spacetime from Hybrid Quantum Cosmology* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Modified Loop Quantum Cosmology of Bianchi I Spacetime* (Oral contribution), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

**Últimos avances en física de la materia condensada** (*National congress*), Madrid (Spain), 13<sup>th</sup> of February 2020.

- *Aislantes y semimetales topológicos* (Contributed talk), Y. Baba.

**CMD2020GEFES** (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 31<sup>st</sup> of August-4<sup>th</sup> of September 2020.

- *Marginal Fermi liquid in twisted bilayer graphene* (Oral contribution), J. González and T. Stauber.
- *Chirality of twisted bilayer graphene* (Oral contribution), T. Stauber, J. González, and G. Gómez-Santos.
- *Landau levels and Hall effect in topological semimetals* (Oral contribution), E. Benito-Matías, J. González, R.A. Molina.
- *Topological bulk currents in Chern Insulators: Theory and observation* (Oral contribution), Alvaro Rubio-García, Chris N. Self, Jiannis K. Pachos, Juan José García Ripoll.
- *Chiral electronics in topological semimetals* (Oral contribution), Y. Baba, F. Domínguez-Adame, R.A. Molina.

**Cold Atom Workshop 2020** (*National congress*), Barcelona (Spain), 15<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of October 2020.

- *Van Hove bound states in the continuum: Localised subradiant states in finite open lattices* (Invited talk), J. Mur-Petit, R.A. Molina.
- *Exact solutions of many body open quantum systems* (Oral contribution), A. Rubio, S. Lerma, J. Dukelsky.
- *Signatures of a critical point in the MBL quantum phase transition* (Oral contribution), A.L. Corps, A. Relaño, R.A. Molina.

**7th Korea-Japan Workshop on Dark Energy** (*International non-UE congress, online*), 7<sup>th</sup>-10<sup>th</sup> of December 2020.

- *Dark energy in multifractional spacetimes* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.
- *Non-oscillating power spectra in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués, Guillermo A. Mena Marugán, and Santiago Prado.

**4th Valencia Winter Workshop on Theoretical Physics** (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 14<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> of December 2020.

- *A concise symplectic formulation for tetrad gravity* (Invited talk), Jesús Fernando Barbero González, Bogar Díaz Jiménez, Juan Margalef Bentabol and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

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

**HUMBOLDT-KOLLEG "Probleme mittelalterlicher Überlieferung und Textkritik: Europäische Philologen im Vergleich"** (*international non-UE congress*), Venice (Italy), January 27<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> of January 2020.

- *A Physico-Chemical Approach to the Analysis of Manuscripts* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.

**Teatro y coleccionismo teatral a finales del siglo XVI: El Conde de Gondomar (24 años después)**, (*international non-UE congress*), Venice (Italy), January 29<sup>th</sup>-31<sup>st</sup> of 2020.

- *Cómo la química puede ayudar a los estudios filológicos: un proyecto de análisis de las tintas de la colección teatral del Conde de Gondomar* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.

**8<sup>th</sup> International Conference on Perspectives in Vibrational Spectroscopy (ICOPVS)** (*international non-UE congress*), Bangalore (India), February 24<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> of 2020.

- *Improvement of the SERS Performance by Anisotropic Nanofabrication and Specific Functionalization of Plasmonic Nanoparticles* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.

**8<sup>th</sup> International Conference on Photonics, Optics and Laser Technology (Photoptics 2020)**, (*international congress*), Valletta (Malta), February 27<sup>th</sup>- 29<sup>th</sup> of 2020.

- *Numerical Identification of Symmetries in Topological Photonics* (Invited talk), V. Giannini.

**Nanolight 2020** (*international congress*), Benasque (Spain), March 8<sup>th</sup>- 4<sup>th</sup> of 2020.

- *Topological quantum dots: a novel platform for THz lasing and quantum optics* (Invited talk), V. Giannini.

**Biennial joint meeting of the Condensed Matter Divisions of the Spanish Royal Physics Society and of the European Physical Society (CMD2020GEFES)**, (*EU congress*), Madrid (Spain), August 31<sup>st</sup>- September 4<sup>th</sup> of 2020.

- *Bound States in the Continuum in metasurfaces with dipolar meta-atoms* (contributed talk), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.

**ImagineNano 2020** (*international congress*), Bilbao (Spain), September 29<sup>th</sup>- October 1<sup>st</sup> of 2020.

- *Transparent Metals* (Invited talk), V. Giannini.

**ISOLDE Workshop and Users Meeting 2020**, (*international non-UE congress*), CERN, Geneva (Switzerland), November 24<sup>th</sup>- 27<sup>th</sup> of 2020.

- *Determination of the experimental upper limit of the rare  $\beta$ -proton branch of  $8B$*  (Poster and oral presentation), S. Viñals I Onses.

**AR&PA 2.0: Resiliencia del Patrimonio Cultural** (*national congress*), Valladolid (Spain), November 26<sup>th</sup>-27<sup>th</sup> of 2020.

- *Taller para niños: ¿Si soplo se me caerá la casa?* (Invited talk), S. Martínez-Ramírez.

**X<sup>th</sup> Tastes of Nuclear Physics @ UWC** (*international non-UE congress*), Ciudad del Cabo (South Africa), November 30<sup>th</sup>- December 4<sup>th</sup> of 2020.

- *Electron capture (and  $B^{+-}$ -decay) of  $8B$  into the highly excited states of  $8Be$*  (Invited talk online), M.J.G. Borge.

#### 4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

**Physics @ Veldhoven 2020** (*National congress*), Veldhoven, The Netherlands, 21-22 of January 2020.

- *Low Temperature Plasmas for Laboratory Astrophysics* (Invited Lecture), Isabel Tanarro, C. Bermúdez, C. Cabezas, J. Cernicharo, J. L. Doménech, V. J. Herrero, R. J. Peláez, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, F. Beltrán, J. M. Hernández, P. de Vicente, J. D. Gallego.

**CMD2020GEFES** (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 31<sup>st</sup> of August-4<sup>th</sup> of September 2020.

- *Synthesis of new carbon nanoarchitectures in the gas-phase* (Invited talk), Lidia Martínez, Gonzalo Santoro, Pablo Merino, Miguel Jiménez, I. Tanarro, V. Herrero, L. Vázquez, A. Mayoral, M. Acolla, G. Ellis, C. Joblin, J. Cernicharo, J. A. Martín-Gago.

#### 4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

**PTI Salud Global, Temática 3 "Diagnóstico y Contención", subtemática 3b) Propagación y Protección**, Meeting virtual, 23rd June 2020.

- *Materiales Virucidas* (Oral Contribution), Aurora Nogales.

**PTI Salud Global, Temática 3 "Diagnóstico y Contención", subtemática 3a) Diagnostico y Contención**, Meeting virtual, 29-30 June 2020.

- *Funcionalización de polímeros a través de la nanoestructuración* (Oral Contribution), Aurora Nogales.

## 4.2. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO VISITORS

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

- ❖ **Dra. Belén Hernández**, associated professor, Université Paris 13, Paris, France, 17<sup>th</sup> - 21<sup>st</sup> of February 2020.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, full professor, Université Paris 13, Paris, France, 17<sup>th</sup> - 21<sup>st</sup> of February 2020.
- ❖ **Mr. Marcelo José dos Santos Oliveira**, postgraduated student, Universidade Estadual de Sao Paulo, Brazil, 8<sup>th</sup> of December 2019 - 8<sup>th</sup> of March 2020.
- ❖ **Mr. Salvatore Caterino**, postgraduated student, University of Venice, Italy, 17<sup>th</sup> of February - 17<sup>st</sup> of May 2020.

## 4.3. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

**Dr. Tomás Ortín**

IFT, CSIC-UAM.

*Stringy corrections to supergravity black holes.*

27<sup>th</sup> January 2020.

### 4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

**Dr. Manuel López-Puertas**

Instituto de Astrofísica de Andalucía IAA-CSIC, Granada.

Non-local thermodynamic equilibrium in planetary atmospheres.

Ciclo oficial de coloquios IEM 2019-2020.

28<sup>th</sup> of January 2020.

## 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

**María Luisa Senent Diez**

- Faculté de Chimie, Université Mohammed V de Rabat, Rabat (Morocco), 11<sup>th</sup>-16<sup>th</sup> of February 2020.
- Laboratoire LSAMA, Faculté de Ciencias, Université de Tunis el Manar, Tunis (Tunisia), 6<sup>th</sup>-13<sup>th</sup> of March 2020.

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

**M<sup>a</sup> José García Borge**

- CERN-Council, –European Particle Physics Strategy Update 2018-2020, 19<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> of January 2020.

**Jose Antonio Briz Monago**

- GANIL, Caen, France, 29<sup>th</sup> of January-8<sup>th</sup> of February 2020.

**Javier Díaz Ovejas**

- GANIL, Caen, France, 29<sup>th</sup> of January-10<sup>th</sup> of February 2020.

**Diego Romero Abujetas**

- Donostia International Physics Center, San Sebastian, Spain, 3<sup>rd</sup> -14<sup>th</sup> of February 2020.

**Capítulo 5**

**LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA  
CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES**

*Chapter 5*

*TEACHING, OUTREACH AND OTHER ACTIVITIES*

## 5.1. DOCENCIA TEACHING

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

#### Jesús Fernando Barbero González

- *El Siglo de la Física* – Bachelor program in Engineering (humanities course), National/Official program. Universidad Carlos III (Madrid). 29<sup>th</sup> January to 21<sup>st</sup> of April - 12 hours.

#### Luis J. Garay Elizondo

- Métodos Matemáticos I, Grado de Física (National Official) - Universidad Complutense de Madrid. 26<sup>th</sup> September 2020 to 20<sup>th</sup> January 2021. 2 groups - 60 hours each group.
- *Universo, Espacio y Tiempo* - Universidad para los mayores (National Official). Universidad Complutense de Madrid. February to May 2020 - 10.5 hours.
- *Universo extraño* - Universidad para los mayores (National Official). Universidad Complutense de Madrid. September 2020 to January 2021 - 7.5 hours.

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

#### Olof Tenglad

- *Laboratory project: "Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials"* – European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering physics (International) – UC3M. 14<sup>th</sup> and 21<sup>st</sup> May 2019 - 8 hours.
- *Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Material (teoría)* – European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics (International) – Laboratory Projects, UC3M. 20<sup>th</sup> April-5<sup>th</sup> of May 2020 - 9 hours.
- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM. 3<sup>rd</sup> February-30<sup>th</sup> April 2020 - 156 hours. Estudiante: Carlos Marcos

#### M<sup>a</sup> Vega Cañamares Arribas

- *Sistemas automáticos miniaturizados, sensores y biosensores en análisis* – Seminario ‘Plasmonic Sensors:SERS’ – Máster en Ciencias y Tecnologías Químicas (National Official) – Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid. 15<sup>th</sup> January 2020 - 1 hour.

#### Vincenzo Giannini

- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM. 14<sup>th</sup> February-31<sup>st</sup> May 2020 - 156 hours. Estudiantes: Mar de Camino, Miguel Ángel Villegas y Adrián Hidalgo

#### Sagrario Martínez Ramírez

- *Ensayos y técnicas no destructivas aplicadas en la diagnosis de las construcciones históricas* – Master – (National Official) – ETS de Arquitectura, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia. 31<sup>st</sup> January 2020 - 3 hours.

#### Diego Romero Abujetas

- *Técnicas Experimentales III* – Grado en Física (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid. 20<sup>th</sup> January-15<sup>th</sup> May 2020 - 35 hours.

### 5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

#### José M. Fernández Sánchez

- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Ciencias Experimentales (National Official), URJC. 2<sup>nd</sup> November 2020-16<sup>th</sup> February 2021 – 500 hours. Estudiante: Nerea Mota

**Vicente Timón Salinero**

- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM. 27<sup>th</sup> January-9<sup>th</sup> March 2020 - 152 hours. Estudiante: Ana Menéndez
- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM. 8<sup>th</sup> January-4<sup>th</sup> March 2020 - 150 hours. Estudiante: Carlos Rodríguez
- *Tutor Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM. 18<sup>th</sup> November-30<sup>th</sup> December 2020 - 150 hours. Estudiante: Josué Jiménez

**5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Mari Cruz García Gutiérrez**

- *Tutora Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Física (National Official), UCM – National Official – Universidad Complutense de Madrid. 3<sup>rd</sup> February-28<sup>th</sup> April 2020 –152 hours. Estudiantes: Darla Manuela Mare y Aarón César del Río

**María José Capitán Aranda**

- *Caracterización de materiales mediante grandes instalaciones* – Máster en Materiales Avanzados – National Official – Universidad Autónoma de Madrid. 29<sup>th</sup> January 2020 – 3 hours.

**Juan Francisco Vega Borrego**

- *Materiales Poliméricos – Prácticas Extra curriculares* – Grado – National Official – Universidad de Alcalá. 13<sup>th</sup> January 2020-29<sup>th</sup> February 2020 – 175 hours. Estudiante: Andrés Cardil
- *Asignatura de Reología* (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas 11<sup>th</sup> February-8<sup>th</sup> March 2020 – 12 hours.

**Javier Ramos Díaz**

- *Tutor de Trabajo Fin de Máster* - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional – Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas. 1<sup>st</sup> January–20<sup>th</sup> July
- *Asignatura de Simulación Molecular* - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional – Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas 25<sup>th</sup> February-2<sup>nd</sup> April 2020 – 14 hours.

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

**5.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****Luis J. Garay Elizondo**

- Dancing till the end of gravitational collapse: black star, University of Waterloo, Waterloo (Canada), May 2020.

**Santiago Prado Loy**

- *A Mini-Introduction to LQG*, String Book Club, Instituto de Física Teórica, CSIC-UAM, Madrid, 22<sup>nd</sup> of May 2020.

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

- *Plasmonic-Enhanced Raman Scattering and its applications in Molecular Detection, Biodiagnostic and Cultural Heritage* (on-line seminar), University of Milano, Italy, 27<sup>th</sup> of November 2020.

### 5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

#### Javier Ramos Díaz

- *Introducción a Materials Studio en la Investigación Química y Ciencias de los Materiales*, Webminar, Madrid, 27th of March 2020.
- *Modelización y Simulación en Ciencias de la Vida usando Discovery Studio*, Webminar, Madrid, 30th of March 2020.

#### Juan Francisco Vega Borrego

- *Rheology of polymers with new architectures (PGMA)*, Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Farmacia, Universidad de Alcalá de Henares, 25th of September 2020.

## 5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS AWARDS

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

#### Jesús Fernando Barbero González

- Associate Editor for General Relativity and Gravitation (Springer-Nature).
- Associate Editor for the Journal of Geometry and Mechanics (American Institute of Mathematical Sciences).

#### Guillermo Antonio Mena Marugán

- External member of the *Committee for Excellence of the PhD Program* in the Physics Faculty, Complutense University of Madrid.
- Member of the Editorial Board of the journal *Universe*.
- Member of the Evaluation Board of the Leonardo Grants in Basic Sciences awarded by the BBVA Foundation.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Loops 22 Conference* (France).

#### Gianluca Calcagni

- Specialty Chief Editor of the journal *Frontiers in Physics* and *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, Cosmology section.
- Adjunct coordinator and co-author of CSIC White Book Volume 9.
- Full Member of LISA Consortium.
- Member of the scientific advisory committee for the international online seminar series on "Quantum Gravity Across Approaches" (QG-AA).

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

- Coordinator of *Nuclear and Particle Physics* Subarea of the State Research Agency.
- Member of the Scientific Advisory Committee of joint GSI / Fair (Darmstadt, Alemania) 2016-2022.
- Member of the P2 Panel of *ERC Advance Grants*, September 2020 to February 2021.
- Member of the Advisory Committee for TRIUMF (Vancouver, Canada), 2014-2020.
- Member of the *Program Advisory Committee* for KVI-CART (Groningen, Netherlands), 2016-2020.
- Member of the *Program Advisory Committee for Nuclear Physics Experiments* at RIKEN RI Beam Factory (NP-PAC), 2019-2022.
- Scientific Adviser of the *Spanish Delegation at the CERN Council*, Dec. 2018 - June 2021.
- Member of the *Advisory Committee for Subatech* (Nantes, France).

#### Santiago Sánchez Cortés

- Member of the *Scientific Advisory Committee of the Chemosensor Journal*.

#### Olof Tengblad

- Member of the *Scientific Committee* of the Canfranc Laboratory LSC.
- Technical coordinator of the *R3B collaboration*, GSI / Fair.
- Member of the *ERNICIP TG Radiological and Nuclear Threats to Critical Infrastructure*, European Commission.



**José Antonio Sánchez Gil**

- OSA *Optics Express* Associate Editor.
- MDPI *Nanomaterials* Review Editor.

**M<sup>a</sup> Vega Cañamares Arribas**

- Secretary/Treasurer of the *Spectroscopy Comitee of the Spanish Optical Society* (Spain) (until July 2020).
- Vicepresident of the *Spectroscopy Comitee of the Spanish Optical Society* (Spain) (since July 2020).

**Vincenzo Giannini**

- 'Plasmonics' Specialty Chief Editor, journal *Frontiers in Plasmonics*, 2020.

**5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga**

- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*.
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG)*.

**Salvador Montero Martín**

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

**José M. Fernández Sánchez**

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

**Isabel Tanarro Onrubia**

- Vocal of the board of the "*Grupo Especializado de Física de Plasmas*" of the *Real Sociedad Española de Física* (Spain) from June 2019.
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the European 47th EPS Conference on Plasma Physics, to be hold on-line, 21<sup>st</sup>-25<sup>th</sup> of June 2021*, from March 2019.

**5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Tiberio Ezquerro Sanz**

- Member of the "Scientific Advisory Committee (SAC)" of the Spanish Synchrotron (ALBA), Barcelona, Spain. Since 2018.
- Chairman of the Review Panel Committees of the Spanish Synchrotron (ALBA), Barcelona, Spain. Since 2019.

**Mari Cruz García Gutiérrez**

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

## 5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN OUTREACH ACTIVITIES AND MATERIAL

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

#### Jesús Fernando Barbero González

*“¿Qué es la relatividad?”*

Talk in IES Fortuny (Madrid)

8<sup>th</sup> of January 2020

*“150 años de la tabla periódica: esos fascinantes elementos químicos”*

Talk in IES Fortuny (Madrid)

8<sup>th</sup> of January 2020

*“Explorando el sistema solar”*

Talk in IES Fortuny (Madrid)

10<sup>th</sup> of January 2020

*“Del cosmos al nano... y más allá”*

Escape room in Instituto de Estructura de la Materia (Madrid)

5<sup>th</sup> of March 2020

*“Base 2, base 3..., base n: curiosidades de los sistemas de numeración”*

Talk (online) in Semana de la Ciencia de Madrid

Instituto de Estructura de la Materia (Madrid)

4<sup>th</sup> of November 2020

#### Gianluca Calcagni

*“La Tierra es plana: Los misterios del universo para todos”*

Talk at IES Pedro Gumiel, Alcalá de Henares

18<sup>th</sup> of February 2020

*“El universo para todos”*

Talk (online) in Semana de la Ciencia de Madrid

Instituto de Estructura de la Materia (Madrid)

5<sup>th</sup> of November 2020

#### Rafael Alejandro Molina Fernández

*“Del cosmos al nano... y más allá”*

Escape room in Instituto de Estructura de la Materia (Madrid)

5<sup>th</sup> of March 2020

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

#### Sagrario Martínez Ramírez

Día Internacional de la Mujer y la niña en la Ciencia-11 de febrero

Conferencia ‘Grandes mujeres científicas en la historia. Mujeres científicas de hoy’

IES Satafi Getafe

20<sup>th</sup> of January 2020

Semana de la Ciencia y Tecnología

Charla ‘Química, energía y materiales de construcción’- CSIC-IEM

IES Federico Garcia Lorca

30<sup>th</sup> of January 2020

Semana de la Ciencia y Tecnología

Taller ‘Química del yeso’- CSIC-CAM. Las Matas, Madrid

30<sup>th</sup> of January 2020

Día Internacional de la Mujer y la niña en la Ciencia

Conferencia 'Grandes mujeres científicas en la historia: Rita Levi Montalcini y Rosalind Franklin. Las mujeres científicas de hoy y en tu barrio'

IES Ramiro de Maeztu, Madrid

11<sup>th</sup> of February 2020

"Del cosmos al nano...y más allá"

Escape Room – IEM-CSIC

C/Serrano 121, Madrid

5<sup>th</sup> of March 2020

Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM

Conferencia online: "Eficiencia de las materias primas en el Patrimonio construido"

6<sup>th</sup> of November 2020

### Diego Romero Abutetas

Actor in "La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia"

Scientific theater – TeatrIEM

- 2<sup>nd</sup> of February 2020. Centro cultural Pablo Iglesias, Alcobendas, Madrid

- 8<sup>th</sup> of February 2020. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

- 16<sup>th</sup> of February 2020. Residencia de Estudiantes, Madrid

### Jessica Roldán Coronel (junto a Sagrario Martínez Ramírez)

Creación de página web del scape room "DEL COSMOS AL NANO...Y MÁS ALLÁ"

<https://nanocosmosescaperoom.wixsite.com/iemcsic>

Creación, mantenimiento y actualización de la página de FACEBOOK del IEM

<https://www.facebook.com/iemcsic/>

Creación, mantenimiento y actualización de la página de INSTAGRAM del IEM

[https://www.instagram.com/iem\\_csic/](https://www.instagram.com/iem_csic/)

## 5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

### Guzmán Tejeda Gala y Vicente Timón Salinero

"Volamos"

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

Colegios Nuestra Señora del Recuerdo y Plácido Domingo, Comunidad de Madrid

Ámbito regional de la Comunidad de Madrid

11<sup>th</sup> and 12<sup>th</sup> of November 2020

### Vicente Timón Salinero

"LOCUCIENCIA"

Programa de ciencia semanal en Radio Almenara 107.6 FM

<http://www.radioalmenara.net/spip.php?rubrique117>

During all 2020

## 5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

### Tiberio Ezquerro Sanz

Actor in "La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia"

Scientific theater – TeatrIEM

- 2<sup>nd</sup> of February 2020. Centro cultural Pablo Iglesias, Alcobendas, Madrid

- 8<sup>th</sup> of February 2020. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

- 16<sup>th</sup> of February 2020. Residencia de Estudiantes, Madrid

**Javier Martínez de Salazar Bascuñana**

Proyecto Covid-Phym

Actividad de divulgación y participación ciudadana

CSIC/IEM/VACC

24<sup>th</sup> of April 2020

Participación de cerca de 5000 usuarios activos y otros medios Institucionales como las Diputaciones de Sevilla, Cádiz, Córdoba, Orense, Huelva o Consejo de las Islas Baleares/Ibiza

Se citan los siguientes enlaces de la repercusión del proyecto en la prensa:

[https://www.diariodesevilla.es/sociedad/CSIC-Ibercivis-proyecto-supercomputador-ciudadano-contracoronavirus\\_0\\_1458454526.html](https://www.diariodesevilla.es/sociedad/CSIC-Ibercivis-proyecto-supercomputador-ciudadano-contracoronavirus_0_1458454526.html)

<https://www.lavanguardia.com/vida/20200424/48694162428/csic-quiere-conectar-miles-de-ordenadores-para-buscar-los-mejores-farmacos.html>

Enlaces:

[http://www.biophym.iem.csic.es/wp-admin/wp-content/uploads/Nota\\_prensa\\_Covid-phym.pdf](http://www.biophym.iem.csic.es/wp-admin/wp-content/uploads/Nota_prensa_Covid-phym.pdf)

[http://www.biophym.iem.csic.es/wp-admin/wp-content/uploads/PROYECTO\\_COVID\\_IBERCIVIS.pdf](http://www.biophym.iem.csic.es/wp-admin/wp-content/uploads/PROYECTO_COVID_IBERCIVIS.pdf)

<https://ibercivis.es/proyecto-covid-phym-estado-plataforma/>

Conferencias de divulgación impartidas:

- *El científico ante la sociedad actual: un enfoque de la psicología*

Seminario - Semana de la Ciencia Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

12<sup>th</sup> of November 2020

- *La práctica de la meditación: un enfoque de la neuropsicología ante un testimonio vital*

Conferencia – Fundación Cajazol, Local de la Fundación en Plaza San Antonio 14, Cádiz

14<sup>th</sup> of November 2020

Otras actividades en los medios:

- *Entrevista Divulgativa sobre el Proyecto Covid.Phym*

**Entrevista en el programa de Radio Onda Cero “De cero al infinito”** a cargo de Paco de León

<https://ibercivis.es/el-proyecto-covid-phym-en-de-cero-al-infinito-de-onda-cero/>

2<sup>nd</sup> of May 2020

- *La práctica de la meditación y las bases neuropsicológicas*

**Entrevista en el programa de televisión “El Mirador” Onda Cádiz TV** a cargo de Marta Tocón y Enrique Miranda

[https://youtu.be/wVlzD0xyp\\_8](https://youtu.be/wVlzD0xyp_8)

14<sup>th</sup> of November 2020

- *Entrevista Divulgativa sobre el Proyecto Covid.Phym*

**Entrevista en el programa de televisión “El Mirador” Onda Cádiz TV** a cargo de Ana Zambrano

<https://youtu.be/272XjugZeDI>

14<sup>th</sup> of November 2020

**Mari Cruz García Gutiérrez**

Playwright, actress and assistant director in “La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia” Scientific theater – TeatrIEM

- 2<sup>nd</sup> of February 2020. Centro cultural Pablo Iglesias, Alcobendas, Madrid

- 8<sup>th</sup> of February 2020. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid

- 16<sup>th</sup> of February 2020. Residencia de Estudiantes, Madrid

**Aurora Nogales Ruiz**

Activity ¿Te atreves a ser científica?? under the program <https://11defebrero.org/> for students of 4º ESO and 1º Bachillerato. Instituto de Enseñanza Secundaria Manuel Elkin Patarroyo (Parla)

13<sup>th</sup> of February 2020

## 5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

### TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

##### ➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

*Meeting attendees:* Santiago Sánchez Cortés  
*Collaboration:* **Saftra Photonics Ltd.**  
*Place:* Videoconference  
*Date:* During all the 2020 year, once a month

##### ➤ MIEMBROS DE COMITÉS CIENTÍFICOS ASESORES

*Member:* Santiago Sánchez Cortés  
*Collaboration:* **Regulaxis SAS Company**  
*Place:* Technological Park in Paris, France  
*Date:* 2020

*Member:* Santiago Sánchez Cortés  
*Collaboration:* **Saftra Photonics Ltd.**  
*Place:* Technological Innovation Park in Kosice (Slovakia)  
*Date:* 2020

##### ➤ INFORMES DE TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA

Santiago Sánchez Cortés  
*Análisis de Pigmentos arqueológicos de la tumba de Djehuty en Luxor*  
**Proyecto Djehuty**  
*Date:* July-August 2020

#### 5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Título de la reunión: Análisis y estrategias en el proyecto HER2/biosimilares  
*Meeting attendees:* Javier Cortés, J. Martínez-Salazar, J.F. Vega, and Javier Ramos  
*Collaboration:* Fundacion Vald'Hebron/Javier Cortés  
*Place:* Hospital Rúber Internacional  
*Date:* 17<sup>th</sup> of February 2020

Título de la reunión: primera reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym  
*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, and Jaime Pérez Val  
*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis  
*Place:* virtual  
*Date:* 3<sup>rd</sup> of April 2020

Título de la reunión: segunda reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym  
*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, and Jaime Pérez Val  
*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis  
*Place:* virtual  
*Date:* 8<sup>th</sup> of April 2020

Título de la reunión: tercera reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym  
*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, Jaime Pérez Val, and Eduardo Actis  
*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis  
*Place:* virtual  
*Date:* 15<sup>th</sup> of April 2020

Título de la reunión: cuarta reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym

*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, Jaime Pérez Val, and Eduardo Actis

*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis

*Place:* virtual

*Date:* 20<sup>th</sup> of April 2020

Título de la reunión: quinta reunión de coordinación y lanzamiento del proyecto Covid-Phym

*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, Jaime Pérez Val, and Eduardo Actis

*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis

*Place:* virtual

*Date:* 24<sup>th</sup> of April 2020

Título de la reunión: sexta reunión de seguimiento, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym

*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, and Jaime Pérez Val

*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis

*Place:* virtual

*Date:* 6<sup>th</sup> of May 2020

Título de la reunión: séptima reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym

*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, and Jaime Pérez Val

*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis

*Place:* virtual

*Date:* 13<sup>th</sup> of May 2020

Título de la reunión: octava reunión de coordinación, análisis y estrategias en el proyecto Covid-Phym

*Meeting attendees:* Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos, Francisco Sanz, Daniel Lisbona, and Jaime Pérez Val

*Collaboration:* CSIC/IEM/Ibercivis

*Place:* virtual

*Date:* 23<sup>th</sup> of June 2020

Título de la reunión: PE characterization topics

*Meeting attendees:* J.F. Vega, A. Sigwal and O. Lhost

*Collaboration:* Total RC/R&D Polymers

*Place:* Virtual

*Date:* 29<sup>th</sup> of June 2020

Título de la reunión: PE characterization topics

*Meeting attendees:* J.F. Vega, A. Sigwal and O. Lhost

*Collaboration:* Total RC/R&D Polymers

*Place:* Virtual

*Date:* 2<sup>nd</sup> of July 2020

## 5.6 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

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

#### Unidades Asociadas / *Associated Units:*

- *Group of Field Theory and Statistical Physics. Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany, University of Carlos III of Madrid.*  
Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**Jesús Fernando Barbero González** (responsible) and José González Carmona.

- *Research group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.  
Responsible: Miguel Carvajal Zaera.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**María Luisa Senent Diez** (responsible), J. Dukelsky, J.M. Fernández, G. Tejada, M.J. García Borge and O. Tengblad.

**María Luisa Senent Diez**

- Member participating in Associated Unit *Department of Physical Chemistry I*, University Complutense of Madrid.

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

**Unidades Asociadas / Associated Units:**

**M<sup>a</sup> José Gacía Borge and Olof Tengblad**

- Members participating in Associated Unit *group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

**Otras actividades / Other activities:**

**M<sup>a</sup> José Gacía Borge**

- Meeting as a member of the *Subatech Advisory Committee*, 12<sup>th</sup>-14<sup>st</sup> of February 2020, Nantes, France.
- Drafting Session as a representative – European Particle Physics Strategy Update 2018 – 2020, 9<sup>th</sup>-24<sup>th</sup> of January 2020, Banhonnef, Germany.
- Meeting as representative of the *Experimental Nuclear Physics Group* of IEM-CSIC and the *State Research Agency* (AEI), 5<sup>th</sup>-6<sup>th</sup> of March 2020, Valencia, Spain.
- Meeting of the *Programme Advisory Committee* (PAC) of KVI, 10<sup>th</sup>-12<sup>th</sup> of March 2020, Groningen, The Netherlands.

**Olof Tengblad**

- Co-organizer of the *ESSnuSB WP5 & WP6 Software Workshop*, 27<sup>th</sup>-31<sup>st</sup> of January 2020, Madrid, Spain.
- Organizer of the *R3B – Proton Tracker Meeting*, GSI, 12<sup>th</sup> -13<sup>th</sup> of March, 2020, Darmstadt, Germany.

**Sagrario Martínez Ramírez**

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

## 5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

**Unidades Asociadas / Associated Units:**

- *Department of Physical Chemistry I*, University Complutense of Madrid.  
Comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I-UCM.  
Responsible: Javier Aoiz Molerés.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga** (responsible), J.L. Doménech Martínez, J.M. Fernández Sánchez, M.L. Senent Diez, I. Tanarro Onrubia, B. Maté Naya and J. Ortigoso Martínez.

**José M. Fernández Sánchez and Guzmán Tejada Gala**

- Members participating in Associated Unit *group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

#### 5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

##### **Unidades Asociadas / Associated Units:**

- *Física de Sistemas Crecidos con Baja Dimensionalidad*, Universidad Autónoma de Madrid.  
Responsible: Jesús Álvarez Alonso.  
Members of the IEM participating in this Associated Unit:  
**María José Capitán Aranda** (responsible).

##### **Otras actividades / Other activities**

###### **Tiberio Ezquerra Sanz**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 1<sup>st</sup>-4<sup>th</sup> December 2020.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain (remote control), 20<sup>th</sup>-21<sup>st</sup> October 2020.

###### **Mari Cruz García Gutiérrez**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, (remote control) 26<sup>th</sup> May 2020.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, (remote control) 1<sup>st</sup>-4<sup>th</sup> December 2020.

###### **Aurora Nogales Ruiz**

- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain (remote control), 20<sup>th</sup>-21<sup>st</sup>-October- 2020.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain (remote control), 17<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> November 2020.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain (remote control), 1<sup>st</sup>-4<sup>th</sup> December 2020.

###### **Javier Ramos Díaz**

- The 14th USERS CONFERENCE gathers RES users to share knowledge and experiences on the use of HPC, Virtual meeting, 16<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> September 2020.



**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. A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra. *Temperature Dependence of the Symmetry Energy Components for Finite Nuclei.* Journal of Physics: Conference Series **1555**, 012004 (2020).
2. J. Arrechea, C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L.J. Garay. *Schwarzschild geometry counterpart in semiclassical gravity.* Physical Review D **101**, 064059 (2020).
3. E. Barausse *et al.*, G. Calcagni [LISA Fundamental Physics Working Group]. *Prospects for fundamental physics with LISA.* General Relativity and Gravitation **52**, 81 (2020).
4. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol and Eduardo J. S. Villaseñor. *A two-sided Faulhaber-like formula involving Bernoulli polynomials.* Comptes Rendues Mathématique **358**, 41 (2020).
5. J. Fernando Barbero G., Jesús Salas and Eduardo J. S. Villaseñor. *On the asymptotics of the rescaled Appell polynomials.* Advances in Applied Mathematics **113**, 101962 (2020).
6. C. Barceló, V. Boyanov, R. Carballo-Rubio, L.J. Garay. *Asymptotic horizon formation, spacetime stretching and causality.* Physical Review D **102**, 045001 (2020).
7. E. Benito-Matías, R.A. Molina, J. González. *Surface and bulk Landau levels in thin films of Weyl semimetals.* Physical Review B **101**, 085320 (2020).
8. D.E. Borrajo Gutiérrez, J.A.R. Cembranos, L.J. Garay, J.M. Sánchez Velázquez. *Derivative couplings in gravitational production in the early universe.* Journal of High Energy Physics **09**, (2020).
9. R. Bousseffi and M.L. Senent. *Computational analysis of the far infrared spectral region of various deuterated varieties of Ethylene Glycol.* Physical Chemistry Chemical Physics **22**, 23785 (2020).
10. Gianluca Calcagni. *Next step in gravity and cosmology: fundamental theory or data-driven models?* Frontiers in Astronomy and Space Sciences **7**, 52 (2020).
11. Calcagni, G., Caballero-Garrido, E. and Pellón, R. *Behavior Stability and Individual Differences in Pavlovian Extended Conditioning.* Frontiers in Psychology **11**, 612 (2020).
12. G. Calcagni and A. De Felice. *Dark energy in multi-fractional spacetimes.* Physical Review D **102**, 103529 (2020).
13. J. Casal and E. Garrido. *Three-body structure of  $^{19}\text{B}$ : Finite-range effects in two-neutron halo nuclei.* Physical Review C **102**, 051304(R) (2020).
14. J. Casal, M. Rodríguez Gallardo, J.M. Arias, E. Garrido, and R. de Diego. *Comment on "From Coulomb excitation cross sections to nonresonant astrophysical rates in three-body systems: The  $^{17}\text{Ne}$  case".* Physical Review C **102**, 069801 (2020).

15. L. Castelló Gomar, A. García-Quismondo, and G.A. Mena Marugán.  
*Primordial Perturbations in the Dapor-Liegener Model of Hybrid Loop Quantum Cosmology.*  
Physical Review D **102**, 083524 (2020).
16. J.A.R. Cembranos, L.J. Garay, J.M. Sánchez Velázquez.  
*Gravitational production of scalar dark matter.*  
Journal of High Energy Physics **06**, 084 (2020).
17. A. A. Ciemny, W. Dominik, T. Ginter, R. Grzywacz, Z. Janas, M. Kuich, C. Mazzocchi, M. Pfützner, M. Pomorski, D. Bazin, T. Baumann, A. Bezbakh, B. P. Crider, M. Cwiok, S. Go, G. Kaminski, K. Kolos, A. Korgul, E. Kwan, S. Liddick, K. Miernik, S. V. Paulauskas, J. Pereira, T. Roginski, K. Rykaczewski, C. Sumithrarachchi, Y. Xiao, H. Schatz, and P. Sarriguren.  
*First identification of  $^{58}\text{Zn}$   $\beta$ -delayed proton emission.*  
Physical Review C **101**, 034305 (2020).
18. A.L. Corps, R.A. Molina, A. Relaño.  
*Thouless energy challenges thermalization on the ergodic side of the many-body localization transition.*  
Physical Review B **102**, 014201 (2020).
19. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, S. Prado, and J.M. Velhinho.  
*Uniqueness Criteria for the Fock Quantization of Dirac Fields and Applications in Hybrid Loop Quantum Cosmology.*  
Universe **06**, 241 (2020).
20. J. Cortez, G.A. Mena Marugán, and J. Velhinho.  
*Quantum Linear Scalar Fields with Time Dependent Potentials: Overview and Applications to Cosmology.*  
Mathematics **08**, 115 (2020).
21. I. C. Danchev, A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.  
*Symmetry energy properties of neutron-rich nuclei from the coherent density fluctuation model applied to nuclear matter calculations with Bonn potentials.*  
Physical Review C **101**, 064315 (2020).
22. Bogar Díaz and J. E. Ramírez.  
*Adiabatic lapse rate of non-ideal gases: The role of molecular interactions and vibrations.*  
Physical Review E **102**, 042107 (2020).
23. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, and S. Prado.  
*Unique Fermionic Vacuum in de Sitter Spacetime from Hybrid Quantum Cosmology.*  
Physical Review D **101**, 123530 (2020).
24. M.K. Gaidarov, I. Moumene, A.N. Antonov, D.N. Kadrev, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra.  
*Proton and neutron skins and symmetry energy of mirror nuclei.*  
Nuclear Physics A **1004**, 122061 (2020).
25. L.J. Garay, A. García Martín-Caro, M. Martín-Benito.  
*Unitary quantization of a charged scalar field and Schwinger effect.*  
Journal of High Energy Physics **04**, 120 (2020).
26. A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.  
*Dapor-Liegener Formalism of Loop Quantum Cosmology for Bianchi I Spacetimes.*  
Physical Review D **101**, 023520 (2020).
27. A. García-Quismondo, G.A. Mena Marugán, and G. Sánchez Pérez.  
*The Time-Dependent Mass of Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology: Dapor-Liegener Regularization.*  
Classical Quantum Gravity **37**, 195003 (2020).
28. E. Garrido and A.S. Jensen.  
*Three identical bosons: Properties in noninteger dimensions and in external fields.*  
Physical Review Research **2**, 033261 (2020).

29. E. Garrido and A.S. Jensen.  
*Few-body structures in the mirror nuclei  $^{11}\text{O}$  and  $^{11}\text{Li}$ .*  
Physical Review C **101**, 034003 (2020).
30. J. González and T. Stauber.  
*Marginal Fermi liquid in twisted bilayer graphene.*  
Physical Review Letters **124**, 186801 (2020).
31. J. González and T. Stauber.  
*Time-reversal symmetry breaking versus chiral symmetry breaking in twisted bilayer graphene.*  
Physical Review B **102**, 081118(R) (2020).
32. S. Lerma-Hernández, A. Rubio-García, and J. Dukelsky.  
*Trigonometric  $SU(N)$  Richardson–Gaudin models and dissipative multi-level atomic systems.*  
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **53**, 395302 (2020).
33. A. López, R.A. Molina.  
*Photoprotected spin Hall effect on graphene with substrate induced Rashba spin-orbit coupling.*  
Journal of Physics: Condensed Matter **32**, 205701 (2020).
34. R.A. Molina, V.A. Gopar.  
*Transition between anomalous and Anderson localization in systems with non-diagonal disorder driven by time-periodic fields.*  
The European Physical Journal B **93**, 1 (2020).
35. J. Mur-Petit, R.A. Molina.  
*Van Hove bound states in the continuum: Localized subradiant states in finite open lattices.*  
Physical Review B **101**, 184306 (2020).
36. J. Rodríguez-Laguna, L. M. Robledo, and J. Dukelsky.  
*Efficient computation of matrix elements of generic Slater determinants.*  
Physical Review A **101**, 012105 (2020).
37. A. Rubio-García, C. N. Self, J. J. García-Ripoll and J. K. Pachos.  
*Seeing topological edge and bulk currents in time-of-flight images.*  
Physical Review B **102**, 041123(R) (2020).
38. P. Sarriguren.  
*Electron-capture decay in isotopic transfermium chains from selfconsistent calculations.*  
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **47**, 125107 (2020).
39. P. Sarriguren, O. Moreno, E. Moya de Guerra, D.N. Kadrev, A.N. Antonov, M.K. Gaidarov.  
*Elastic magnetic electron scattering from odd-A nuclei.*  
Journal of Physics: Conference Series **1555**, 012001 (2020).
40. C. N. Self, A. Rubio-García, J. J. García-Ripoll, and J. K. Pachos.  
*Topological bulk states and their currents.*  
Physical Review B **102**, 045424 (2020).
41. M.L. Senent.  
*The torsion-torsion-bending spectrum of S-methyl thioformate.*  
Journal of Molecular Structure **1208**, 127856 (2020).
42. T. Stauber, J. González, and G. Gómez-Santos.  
*Change of chirality at magic angles of twisted bilayer graphene.*  
Physical Review B **102**, 081404(R) (2020).

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

43. R. Avigo, O. Wieland, A. Bracco, F. Camera, F. Ameil, T. Arici, A. Ataç, D. Barrientos, D. Bazzacco, P. Bednarczyk, G. Benzoni, B. Birkenbach, N. Blasi, H.C. Boston, S. Bottoni, S. Brambilla, B. Bruyneel, M. Ciemała, E. Clément, M.L. Cortés, F.C.L. Crespi, D.M. Cullen, D. Curien, F. Didierjean, C. Domingo-Pardo, G. Duchêne, J. Eberth, A. Görgen, A. Gadea, J. Gerl, N. Goel, P. Golubev, V. González, M. Górská, A. Gottardo, E. Gregor, G. Guastalla, T. Habermann, L.J. Harkness-Brennan, A. Jungclaus, M. Kmiecik, I. Kojouharov, W. Korten, N. Kurz, M. Labiche, N. Lalovic', S. Leoni, M. Lettmann, A. Maj, R. Menegazzo, D. Mengoni, E. Merchan, B. Million, A.I. Morales, D.R. Napoli, C. Nociforo, J. Nyberg, N. Pietralla, et al.  
*Low-lying electric dipole  $\gamma$ -continuum for the unstable  $^{62,64}\text{Fe}$  nuclei: Strength evolution with neutron number.*  
Physics Letters B **811**, 135951 (2020).
44. D.R. Abujetas, J. Olmos-Trigo, J.J. Sáenz and J.A. Sánchez-Gil.  
*Coupled electric and magnetic dipole formulation for planar arrays of particles: Resonances and bound states in the continuum for all-dielectric metasurfaces.*  
Physical Review B **102**, 12, 125411(2020).
45. D.R. Abujetas and J.A. Sánchez-Gil.  
*Spin Angular Momentum of Guided Light Induced by Transverse Confinement and Intrinsic Helicity.*  
ACS Photonics **7**, 2, 534-545 (2020).
46. Olga Arroyo-Gason, R ba. Fernandez-Perea, Eric Suarez Morell, Carlos Cabrillo, Leonor Chico.  
*One-Dimensional Moire Superlattices and Flat Bands in Collapsed Chiral Carbon Nanotubes.*  
Nano letters **20**, 10, 7588-7593(2020).
47. J. Benito, L.M. Fraile, A. Korgul, M. Piersa, E. Adamska, A.N. Andreyev, R. Álvarez-Rodríguez, A.E. Barzakh, G. Benzoni, T. Berry, M.J.G. Borge, M. Carmona, K. Chrysalidis, C. Costache, J.G. Cubiss, T. D. Goodacre, H. De Witte, D.V. Fedorov, V.N. Fedosseev, G. Fernández-Martínez, A. Fijałkowska, M. Fila, H. Fynbo, D. Galaviz, P. Galve, M. García-Díez, P.T. Greenlees, R. Grzywacz, L.J. Harkness-Brennan, C. Henrich, M. Huyse, P. Ibáñez, A. Illana, Z. Janas, J. Jolie, D.S. Judson, V. Karayonchev, M. Kicinska-Habior, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Lazarus, R. Lica, A. López-Montes, M. Lund, H. Mach, M. Madurga, I. Marroquín, B. Marsh, M.C. Martínez, E. Nácher, A. Perea, D. Sánchez-Parcerisa, V. Sánchez-Tembleque, O. Tengblad, J.M. Udías, V. Vedia, A. Villa-Abaunza and S. Viñals.  
*Detailed spectroscopy of doubly magic  $^{132}\text{Sn}$ .*  
Physical Review C **101**, 1, 014328 (2020).
48. T.A. Berry, Z. Podolyák, R.J. Carroll, R. Lica, B.A. Brown, H. Grawe, C. Sotty, N.K. Timofeyuk, T. Alexander, A.N. Andreyev, S. Ansari, M.J.G. Borge, M. Brunet, J.R. Cresswell, C. Fahlander, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, E. Gamba, W. Gelletly, R.B. Gerst, M. Górská, A. Gredley, P. Greenlees, L.J. Harkness-Brennan, M. Huyse, S.M. Judge, D.S. Judson, J. Konki, M. Kowalska, J. Kurcewicz, I. Kuti, S. Lalkovski, I. Lazarus, M. Lund, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean I. Marroquin, C. Mihai, R.E. Mihai, E. Nácher, A. Negret, S. Nae, C. Nita, S. Pascu, R.D. Page, Z. Patel, A. Perea, J. Phrompao, O. Tengblad, V. Vedia.  
*Octupole states in  $^{207}\text{Tl}$  studied through beta decay.*  
Physical Review C **101**, 5, 054311 (2020).
49. M. Brunet, T. A. Berry, Zs. Podolyak, R. J. Carroll, R. Lica, Ch. Sotty, A. N. Andreyev, M. J. G. Borge, J. G. Cubiss, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, E. Gamba, P. Greenless, L. J. Harkness-Brennan, M. Huyse, D. S. Judson, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Lazarus, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, I. Marroquin, C. Mihai, E. Nacher, A. Negret, S. Pascu, R. D. Page, A. Perea, J. Phrompao, M. Piersa, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, P. H. Regan, F. Rotaru, M. Rudigier, C. M. Shand, R. Shearman, E. C. Simpson, T. Stora, O. Tengblad, et al.  
 *$^{208}\text{Po}$  populated through  $EC/\beta +$  decay.*  
Journal of Physics: Conference Series **1643**, 012116 (2020).
50. P.A. Butler, L.P. Gaffney, P. Spagnoletti, K. Abrahams, M. Bowry, J. Cederkäll, G. De Angelis, H. De Witte, P.E. Garrett, A. Goldkuhle, C. Henrich, A. Illana, K. Johnston, D.T. Joss, J.M. Keatings, N.A. Kelly, M. Komorowska, J. Konki, T. Kröll, M. Lozano, B.S. Nara Singh, D. O'Donnell, J. Ojala, R.D. Page, L.G. Pedersen, C. Raison, P. Reiter, J.A. Rodriguez, D. Rosiak, S. Rothe, M. Scheck, M. Seidlitz, T.M. Shneidman, B. Siebeck, J. Sinclair, J.F. Smith, M. Stryczyk, P. Van Duppen, S. Vinals, et al.  
*Evolution of Octupole Deformation in Radium Nuclei from Coulomb Excitation of Radioactive Ra 222 and Ra 228 Beams.*  
Physical Review Letters **124**, 4, 042503(2020).

51. P.A. Butler, L.P. Gaffney, P. Spagnoletti, J. Konki, M. Scheck, J.F. Smith, K. Abrahams, M. Bowry, J. Cederkäll, T. Chupp, G. de Angelis, H. De Witte, P.E. Garrett, A. Goldkuhle, C. Henrich, A. Illana, K. Johnston, D.T. Joss, J.M. Keatings, N.A. Kelly, M. Komorowska, T. Kröll, M. Lozano, B.S.N. Singh, D. O'Donnell, J. Ojala, R.D. Page, L.G. Pedersen, C. Raison, P. Reiter, J.A. Rodriguez, D. Rosiak, S. Rothe, T.M. Shneidman, B. Siebeck, M. Seidlitz, J. Sinclair, M. Stryczyk, P. Van Duppen, S. Vinals, V. Virtanen, N. Warr, K. Wrzosek-Lipska, and M. Zielinska. *Addendum: The observation of vibrating pear-shapes in radon nuclei.* Nature Communications **11**, 1, 3560(2020).
52. P. Cabanelas, H. Alvarez-Pol, J. M. Boillos, E. Casarejos, J. Cederkall, D. Cortina, M. Feijoo, D. Galaviz, E. Galiana, R. Gernhäuser, P. Golubev, D. González, A.-L. Hartig, A. Heinz, H. Johansson, P. Klenze, A. Knyazev, T. Kröll, E. Nacher, J. Park, A. Perea, L. Ponnath, H.-B. Rhee, J. L. Rodríguez-Sánchez, C. Suerder, O. Tengblad and P. Teubig. *Commissioning of the CALIFA Barrel Calorimeter of the R3B Experiment at FAIR.* Journal of Physics: Conference Series 1667, 012006 (2020).
53. P. Cabanelas, D. González, H. Alvarez-Pol, J.M. Boillos, E. Casarejos, J. Cederkall, D. Cortina, M. Feijoo, D. Galaviz, E. Galiana, R. Gernhäuser, P. Golubev, A.L. Hartig, P. Klenze, A. Knyazev, T. Kröll, E. Nacher, J. Park, A. Perea, B. Pietras, L. Ponnath, H.B. Rhee, J.L. Rodríguez-Sánchez, C. Suerder, O. Tengblad and P. Teubig. *Performance recovery of long CsI(Tl) scintillator crystals with APD-based readout.* Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **965**, 163845 (2020).
54. Maria Vega Cañamares, Maria Goretti Mieites-Alonso, Marco Leona. *Fourier transform-Raman and surface-enhanced Raman spectroscopy analysis of safflower red-dyed washi paper: pH study and bands assignment.* Journal of Raman Spectroscopy **51**, 903 (2020).
55. R. J. Carroll, Zs. Podolyák, T. Berry, H. Grawe, T. Alexander, A. N. Andreyev, S. Ansari, M. J. G. Borge, M. Brunet, J. R. Creswell, L. M. Fraile, C. Fahlander, H. O. U. Fynbo, E. R. Gamba, W. Gelletly, R.-B. Gerst, M. Górská, A. Gredley, P. T. Greenlees, L. J. Harkness-Brennan, M. Huysse, S. M. Judge, D. S. Judson, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Kuti, S. Lalkovski, I. H. Lazarus, R. Lică, M. Lund, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, I. Marroquin, C. Mihai, R. E. Mihai, E. Nacher, A. Negret, C. Nita, S. Pascu, R. D. Page, Z. Patel, A. Perea, J. Phrompao, M. Piersa, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, P. H. Regan, F. Rotaru, M. Rudigier, C. M. Shand, R. Shearman, S. Stegemann, T. Stora, Ch. Sotty, O. Tengblad, P. Van Duppen, V. Vedia, R. Wadsworth, P. M. Walker, N. Warr, F. Wearing, and H. De Witte. *Competition between Allowed and First-Forbidden  $\beta$  Decay: The Case of  $^{208}\text{Hg} \rightarrow ^{208}\text{Tl}$*  Physical Review Letters **125**, 19, 192501(2020).
56. B. Cederwall, X. Liu, O. Aktas, A. Ertoprak, W. Zhang, C. Qi, E. Clément, G. De France, D. Ralet, A. Gadea, A. Goasduff, G. Jaworski, I. Kuti, B.M. Nyakó, J. Nyberg, M. Palacz, R. Wadsworth, J.J. Valiente-Dobón, H. Al-Azri, A. Ataç Nyberg, T. Bäck, G. De Angelis, M. Doncel, J. Dudouet, A. Gottardo, M. Jurado, J. Ljungvall, D. Mengoni, D.R. Napoli, C.M. Petrache, D. Sohler, J. Timár, D. Barrientos, P. Bednarczyk, G. Benzoni, B. Birkenbach, A.J. Boston, H.C. Boston, I. Burrows, L. Charles, M. Ciemala, F.C.L. Crespi, D.M. Cullen, P. Désesquelles, C. Domingo-Pardo, J. Eberth, N. Erduran, S. Ertürk, V. González, T. Huyuk, A. Jungclaus, R.M. Perez-Vidal and E. Sanchis. *Isospin Properties of Nuclear Pair Correlations from the Level Structure of the Self-Conjugate Nucleus  $^{88}\text{Ru}$ .* Physical Review Letters **124**, 6, 062501(2020).
57. M. Ciemala, S. Ziliani, F.C.L. Crespi, S. Leoni, B. Fornal, A. Maj, P. Bednarczyk, G. Benzoni, A. Bracco, C. Boiano, S. Bottoni, S. Brambilla, M. Bast, M. Beckers, T. Braunroth, F. Camera, N. Cieplicka-Orynczak, E. Clément, S. Coelli, O. Dorvaux, S. Erturk, G. De France, C. Fransen, A. Goldkuhle, J. Grebosz, M.N. Harakeh, W. Iskra, B. Jacquot, A. Karpov, M. Kicinska-Habior, Y. Kim, M. Kmiecik, A. Lemasson, S.M. Lenzi, M. Lewitowicz, H. Li, I. Matea, K. Mazurek, C. Michelagnoli, M. Matejska-Minda, B. Million, C. Müller-Gatermann, V. Nanal, P. Napiorkowski, D.R. Napoli, R. Palit, M. Rejmund, C. Schmitt, M. Stanoiu, J. Collado, C. Domingo-Pardo, V. González, A. Jungclaus, et al. *Testing ab initio nuclear structure in neutron-rich nuclei: Lifetime measurements of second  $2+$  state in  $^{16}\text{C}$  and  $^{20}\text{O}$ .* Physical Review C **101**, 2, 021303 (R) (2020).
58. P. Colovic, S. Szilner, A. Illana, J. J. Valiente-Dobón, L. Corradi, G. Pollarolo, T. Mijatovic, A. Goasduff, G. Benzoni, M. J. G. Borge, A. Boso, A. Boukhari, S. Ceruti, J. G. Cubiss, G. de Angelis, H. De Witte, E. Fioretto, Ch. Fransen, F. Galtarossa, L. P. Gaffney, E. Giannopoulos, H. Hess, M. L. Jurado-Gomez, L. Kaya, Th. Kröll, T. Marchi, R. Menegazzo, D. Mengoni, D. R. Napoli, G. O'Neill, J. Pakarinen, et al. *Population of lead isotopes in binary reactions using a  $^{94}\text{Rb}$  radioactive beam.* Physical Review C **102**, 5, 054609(2020).

59. Cortés, M.L.; Rodriguez, W.; Doornenbal, P.; Obertelli, A.; Holt, J.D.; Lenzi, S.M.; Menéndez, J.; Nowacki, F.; Ogata, K.; Poves, A.; Rodríguez, T.R.; Schwenk, A.; Simonis, J.; Stroberg, S.R.; Yoshida, K.; Achouri, L.; Baba, H.; Browne, F.; Calvet, D.; Château, F.; Chen, S.; Chiga, N.; Corsi, A.; Delbart, A.; Gheller, J.M.; Giganon, A.; Gillibert, A.; Hilaire, C.; Isobe, T.; Kobayashi, T.; Kubota, Y.; Lapoux, V.; Liu, H.N.; Motobayashi, T.; Murray, I.; Otsu, H.; Panin, V.; Paul, N.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Steppenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Aktas, O.; Aumann, T.; Vaquero, V.  
*Shell evolution of  $N=40$  isotones towards  $^{60}\text{Ca}$ : First spectroscopy of  $^{62}\text{Ti}$ .*  
Physics Letters B **800**, 135071 (2020).
60. M. L. Cortés, W. Rodriguez, P. Doornenbal, A. Obertelli, J. D. Holt, J. Menéndez, K. Ogata, A. Schwenk, N. Shimizu, J. Simonis, Y. Utsuno, K. Yoshida, L. Achouri, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, S. Chen, N. Chiga, A. Corsi, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, H. N. Liu, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl, Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gašparic, R.-B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, D. Kim, T. Koiwai, Y. Kondo, P. Koseoglou, J. Lee, C. Lehr, B. D. Linh, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, P.-A. Söderström, D. Sohler, S. Takeuchi, H. Toernqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. Wang, V. Werner, X. Xu, H. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda, and L. Zanetti.  
 *$N = 32$  shell closure below calcium: Low-lying structure of  $^{50}\text{Ar}$ .*  
Physical Review C **102**, 064320 (2020).
61. Ana Crespo, Iván Díaz, Delphine Neff, Irene Llorente, Sagrario Martínez-Ramírez and Emilio Cano.  
*Effect of Sulfuric Acid Patination Treatment on Atmospheric Corrosion of Weathering Steel.*  
Metals **10**, 5, 591 (2020).
62. S. Cruz, K. Wimmer, S.S. Bhattacharjee, P.C. Bender, G. Hackman, R. Krücken, F. Ames, C. Andreoiu, R.A.E. Austin, C.S. Bancroft, R. Braid, T. Bruhn, W.N. Catford, A. Cheeseman, A. Chester, D.S. Cross, C.A. Diget, T. Drake, A.B. Garnsworthy, R. Kanungo, A. Knapton, W. Korten, K. Kuhn, J. Lassen, R. Laxdal, M. Marchetto, A. Matta, D. Miller, M. Moukaddam, N.A. Orr, N. Sachmpazidi, A. Sanetullaev, C.E. Svensson, N. Terpstra, C. Unsworth and P.J.Voss.  
*Single-particle structure in neutron-rich Sr isotopes approaching the  $N=60$  shape transition.*  
Physical Review C **102**, 2, 024335(2020).
63. Bingyu Cui, Jonathan F. Gebbia, Michela Romanini, Svemir Rudic, Ricardo Fernandez-Perea, F. Javier Bermejo, Josep-Lluís Tamarit and Alessio Zaccane.  
*Secondary relaxation in the terahertz range in 2-adamantanone from theory and experiments.*  
Physical Review B **101**, 10, 104202(2020).
64. P. Das, Ushasi Datta, S. Chakraborty, A. Rahman, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A.N. Andreyev, A. Becerril, P. Bhattacharya, A. Bhattacharyya, J. Cederkall, H. De Witte, L. M. Fraile, A. Gottberg, P. T. Greenlees, L.J. Harkness-Brennan, M. Huyse, D.S. Judson, J. Konki, J. Kurcewicz, M. Kowalska, I. Lazarus, R. Lica, S. Mandal, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, C. Mihai, I. Morroquin, E. Nacher, A. Negret, R. D. Page, S.Pascu, A. Perea, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, F. Rotaru, J. Ray, C. O. Sotty, P. Van Duppen, V. Vedia, N. Warr, T. Stora, R.Wadsworth.  
*Study of exotic decay of Cs isotope close to the proton drip line.*  
Journal of Physics: Conference Series **1643**, 012127(2020).
65. J.L. Egido and A. Jungclauss.  
*Predominance of Triaxial Shapes in Transitional Super-Heavy Nuclei: Ground-State Deformation and Shape Coexistence along the Flerovium ( $Z=114$ ) Chain of Isotopes.*  
Physical Review Letters **125**, 19, 192504 (2020).
66. Y. Feng, P. Leiderer, R. Zhao, X. Xiao, V. Giannini, S.A. Maier, C.A. Nemitz, Z. Lin, N. Ding, G. Kang, D. Cheng, L. Schmidt-Mende, L. Huang and Y. Wang.  
*Giant polarization anisotropic optical response from anodic aluminum oxide templates embedded with plasmonic metamaterials.*  
Optics Express **28**, 20, 29513-29528 (2020).
67. Moisés Frías, Raquel Vigil de la Villa, Sagrario Martínez-Ramírez, Lucía Fernández-Carrasco, Ernesto Villar-Cociña and Rosario García-Giménez.  
*Multi-Technique Characterization of a Fine Fraction of CDW and Assessment of Reactivity in a CDW/Lime System.*  
Minerals **10**, 7, 590 (2020).

68. M. Frías, R. Vigil de la Villa, S. Martínez-Ramirez, R. García-Gimenez, M.I. Sánchez de Rojas. *Mineral phases in metakaolin-portlandite pastes cured 15 years at 60 °C. New data for scientific advancement.* Applied Clay Science **184**, 105368 (2020).
69. A. Frotscher, M. Gómez-Ramos, A. Obertelli, P. Doornenbal, G. Authelet, H. Baba, D. Calvet, F. Château, S. Chen, A. Corsi, A. Delbart, J.M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, T. Isobe, V. Lapoux, M. Matsushita, S. Momiyama, T. Motobayashi, M. Niikura, H. Otsu, N. Paul, C. Péron, A. Peyaud, E.C. Pollacco, J.Y. Roussé, H. Sakurai, C. Santamaria, M. Sasano, Y. Shiga, N. Shimizu, D. Steppenbeck, S. Takeuchi, R. Taniuchi, T. Uesaka, H. Wang, K. Yoneda, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A.M. Bruce, R. Carroll, L.X. Chung, M.L. Cortés, M. Dewald, B. Ding, Z. Dombradi, F. Flavigny, A. Jungclaus and V. Vaquero. *Sequential Nature of (p,3p) Two-Proton Knockout from Neutron-Rich Nuclei.* Physical Review Letters **125**, 1, 012501(2020).
70. K. Göbel, M. Heil, L. Bott, L. Brandenburg, C. Caesar, I. Deuter, A. Grein, A. Keliç-Heil, D. Körper, B. Löher, R. Reifarh, D. Savran, H. Schulte, H. Simon, H. Törnqvist, T. Almusidi, H. Álvarez-Pol, L. Atkins, T. Aumann, D. Bemmerer, J. Benlliure, K. Boretzky, B. Brückner, P. Cabanelas Eiras, E. Casarejos, J. Cederkal, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, A. Danilov, P. Erbacher, S. Escribano Rodriguez, Z. Fülöp, A. Falduto, S. Fiebiger, I. Gašparić, M.J.G. Borge, R. Gernhäuser, J. Glorius, D. Gonzales Caamaño, A.-L. Hartig, T. Heftrich, H. Heggen, M. Heine, A. Heinz, T. Hensel, M. Holl, H.T. Johansson, B. Jonson, N. Kalantar-Nayestanaki, A. Kamenyero, K. Khasawneh, O. Kiselev, P. Klenze, M. Kohls, T. Kröll, D. Kresan, D. Kurtulgil, N. Kurz, C. Langer, C. Lehr, Y. Litvinov, E. Lorenz, S. Murillo Morales, E. Nacher, T. Nilsson, J. Park, S. Paschalis, A. Perea, M. Petri, R. Plag, L. Ponnath, R. Popočovski, M. Reich, H.B. Rhee, J.L. Rodriguez Sanchez, D. Rossi, H. Scheit, K. Schmidt, Z. Slavkovská, V. Starostin, S. Storck, Ch. Sürder, J. Tanaka, O. Tengblad, B. Thomas, S. Typel, L.Varga, et al. *Coulomb dissociation of  $^{16}\text{O}$  into  $^4\text{He}$  and  $^{12}\text{C}$ .* Journal of Physics: Conference Series **1668**, 1, 012016 (2020).
71. V. Guadilla, J.L. Tain, A. Algora, J. Agramunt, D. Jordan, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, S.E. Orrigo, B. Rubio, E. Valencia, J.A. Briz, A. Cucoanes, M. Estienne, M. Fallot, L. Le Meur, A. Porta, T. Shiba, A-A. Zakari-Issoufou, J. Aysto, T. Eronen, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, A. Kankainen, V.S. Kolhinen, J. Koponen, I.D. Moore, H. Penttila, I. Pohjalainen, Reinikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, K. Rytönen, V. Sonnenschein, A. Voss, L.M. Fraile, V. Vedia, E. Ganioglu, W. Gelletly, M. Lebois, J.N. Wilson, T. Martinez, E. Nacher, A.A. Sonzogni. *Determination of beta-decay ground state feeding of nuclei of importance for reactor applications.* Physical Review C **102**, 064304 (2020).
72. Syed K. Islam, Yin Pak Cheng, Ronald L. Birke, Maria Vega Canamares, Cyril Muehlethaler, John R. Lombardi. *An Analysis of Tetrahydrocannabinol (THC) and Its Analogs Using Surface Enhanced Raman Scattering (SERS).* Chemical Physics, **536**, 110812 (2020).
73. A. Jungclaus, J.M. Keatings, G.S. Simpson, H. Naïdja, A. Gargano, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Gey, G. Lorusso, P.A. Söderström, T. Sumikama, J. Taprogge, Z.Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, 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, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, S. Bönig, J.M. Daugas, R. Gernhäuser, S. Ilieva, T. Kröll, A. Montaner-Piza, K. Moschner, D. Mücher, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi and M. Scheck. *Evolution of proton single-particle states in neutron-rich Sb isotopes beyond  $N=82$ .* Physical Review C **102**, 3, 034324 (2020).
74. A. Knyazev, J. Park, P. Golubev, J. Pallon, J. Cederkall, H. Alvarez-Pol, J. Benlliure, J.A. Briz, P. Cabanelas, E. Casarejos, D. Cortina-Gil, P.D. Fernández, M. Feijoo, D. Galaviz, E. Galiana, M.J.G. Borge, R. Gernhäuser, D. Gonzalez, C. Gutierrez-Neira, A.L. Hartig, A. Heinz, B. Heiss, H. Johansson, P. Klenze, T. Kröll, T. Nilsson, A. Perea, L. Ponnath, H.B. Rhee, J.L. Rodriguez-Sanchez, O. Tengblad and P. Teubig. *Tl concentration and its variation in a CsI(Tl) crystal for the CALIFA detector.* Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment **975**, 164197 (2020).
75. W. Korten, A. Atac, D. Beaumel, P. Bednarczyk, M.A. Bentley, G. Benzoni, A. Boston, A. Bracco, J. Cederkäll, B. Cederwall, M. Ciemala, E. Clément, F.C.L. Crespi, D. Curien, G. de Angelis, F. Didierjean, D.T. Doherty, Z. Dombradi, G. Duchêne, J. Dudek, B. Fernandez-Dominguez, B. Fornal, A. Gadea, L.P. Gaffney, J. Gerl, K. Gladnishki, A. Goasduff, M. Górska, P.T. Greenlees, H. Hess, D.G. Jenkins, P.R. John, A. Jungclaus, M. Kmiecik, A. Korichi, M. Labiche, S. Leoni, J. Ljungvall, A. Lopez-Martens, D. Maj, B. Mengoni, A. Million, D. Nannini, P.J. Napoli, J. Nolan, A. Nyberg, A. Obertelli, J. Pakarinen, N. Pietralla, B. Quintana and K. Wimmer. *Physics opportunities with the Advanced Gamma Tracking Array: AGATA.* European Physical Journal A **56**, 5, 137 (2020).



76. P. Koseoglou, V. Werner, N. Pietralla, P.-A. Söderström, P. Doornenbal, A. Obertelli, N. Achouri, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, S. Chen, N. Chiga, A. Corsi, M. L. Cortés, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, H. Liu, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl, Y. L. Sun, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann, L. X. Chung, F. Flavigny, S. Franchoo, I. Gasparic, R.-B. Gerst, J. Gibelin, K. I. Hahn, D. Kim, T. Koivai, Y. Kondo, J. Lee, C. Lehr, M. Lettmann, B. D. Linh, T. Lokotko, M. MacCormick, K. Moschner, T. Nakamura, S. Y. Park, D. Rossi, E. Sahin, D. Sohler, S. Takeuchi, H. Toernqvist, V. Vaquero, V. Wagner, S. Wang, X. Xu, H. Yamada, D. Yan, Z. Yang, M. Yasuda and L. Zanetti.  
*Spectroscopy of neutron-rich scandium isotopes.*  
Journal of Physics: Conference Series **1555**, 012026 (2020).
77. J. Lasa-Alonso, D. R. Abujetas, A. Nodar, J. A. Dionne, J. J. Saenz, G. Molina-Terriza, J. Aizpurua, A. Garcia-Etxarri.  
*Surface-Enhanced Circular Dichroism Spectroscopy on Periodic Dual Nanostructures.*  
ACS Photonics **7**, 2978-2986 (2020).
78. C. Lizarazo, P.-A. Söderström, V. Werner, N. Pietralla, P.M. Walker, G.X. Dong, F.R. Xu, T.R. Rodríguez, F. Browne, P. Doornenbal, S. Nishimura, C.R. Niță, A. Obertelli, T. Ando, T. Arici, G. Authelet, H. Baba, A. Blazhev, A.M. Bruce, D. Calvet, R.J. Carroll, F. Château, S. Chen, L.X. Chung, A. Corsi, M.L. Cortés, A. Delbart, M. Dewald, B. Ding, F. Flavigny, S. Franchoo, J. Gerl, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, M. Górska, A. Gottardo, I. Kojouharov, N. Kurz, V. Lapoux, J. Lee, M. Lettmann, B.D. Linh, J.J. Liu, Z. Liu, S. Momiyama, K. Moschner, T. Motobayashi, S. Nagamine, N. Nakatsuka, M. Niikura, C. Nobs, L. Olivier, Z. Patel, N. Paul, Z. Podolyák, J.-Y. Roussé, M. Rudigier, T.Y. Saito, H. Sakurai, C. Santamaria, H. Schaffner, C. Shand, I. Stefan, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Uesaka, V. Vaquero, K. Wimmer and Z. Xu.  
*Metastable States of Se 92,94: Identification of an Oblate K Isomer of Se 94 and the Ground-State Shape Transition between N=58 and 60.*  
Physical Review Letters, **124**, 22, 222501(2020).
79. M. Martín-Garrido, S. Martínez-Ramírez, G. Pérez and A.M. Guerrero.  
*Study of C-S-H dehydration due to temperature increase during fires.*  
Journal of Raman Spectroscopy **51**, 11, 2318-2327 (2020).
80. M. Martín-Garrido, M. T. Molina-Delgado, S. Martínez-Ramírez.  
*A comparison between experimental and theoretical Ca/Si ratios in C-S-H and C-S(A)-H gels.*  
J Sol-Gel Sci Technol **94**, 11-21 (2020).
81. S. Momiyama, K. Wimmer, D. Bazin, J. Belarge, P. Bender, B. Elman, A. Gade, K.W. Kemper, N. Kitamura, B. Longfellow, E. Lunderberg, M. Niikura, S. Ota, P. Schrock, J.A. Tostevin and D. Weisshaar.  
*Shell structure of  $^{43}\text{S}$  and collapse of the N=28 shell closure.*  
Physical Review C **102**, 3, 034325 (2020).
82. S. Murai, D.R. Abujetas, G.W. Castellanos, J.A. Sánchez-Gil, F. Zhang and J.G. Rivas.  
*Bound states in the continuum in the visible emerging from out-of-plane magnetic dipoles.*  
ACS Photonics **7**, 8, 2204-2210 (2020).
83. A. Muscolo, D. Pizzeghello, O. Francioso, S. Sanchez-Cortes and S. Nardi.  
*Effectiveness of Humic Substances and Phenolic Compounds in Regulating Plant-Biological Functionality.*  
Agronomy-Basel **10**, 10, 1553 (2020).
84. Jorge Olmos-Trigo, Diego R. Abujetas, Cristina Sanz-Fernández, José A. Sánchez-Gil, and Juan José Sáenz.  
*Optimal backward light scattering by dipolar particles.*  
Physical Review Research **2**, 1, 013225(2020).
85. Jorge Olmos-Trigo, Diego R. Abujetas, Cristina Sanz-Fernández, Xavier Zambrana-Puyalto, Nuno de Sousa, José A. Sánchez-Gil and Juan José Sáenz.  
*Unveiling dipolar spectral regimes of large dielectric Mie spheres from helicity conservation.*  
Physical Review Research **2**, 4, 04302(2020).
86. J. Olmos-Trigo, C. Sanz-Fernández, D.R. Abujetas, J. Lasa-Alonso, N. De Sousa, A. García-Etxarri, J.A. Sánchez-Gil, G. Molina-Terriza and J.J. Sáenz.  
*Kerker Conditions upon Lossless, Absorption, and Optical Gain Regimes.*  
Physical Review Letters **125**, 7, 073205 (2020).

87. J.D. Ovejas, A. Knyazev, I. Martel, O. Tengblad, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, N. Keeley, K. Rusek, C. García-Ramos, L.A. Acosta, A.A. Arokiaraj, M. Babo, T. Cap, N. Ceylan, G. De Angelis, A. Di Pietro, J.P. Fernández, P. Figuera, L. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, J.H. Jensen, B. Jonson, R. Kotak, T. Kurtukian, M. Madurga, G. Marquín-Durán, M. Munch, A.K. Orduz, R. Honório, A. Pakou, T. Pérez, A. Peralta, A. Perea, R. Raabe, M. Renaud, K. Riisager, A.M. Sánchez-Benítez, J. Sánchez-Segovia, O. Sgouros, V. Soukeras, P. Teubig, S. Viñals, M. Wolinska-Cichocka, R. Wolski, J. Yang.  
*Halo effects in the low-energy scattering of  $^{15}\text{C}$  with heavy targets.*  
*Acta Physica Polonica B* **51**, 3, 731-736 (2020).
88. J. D. Ovejas, A. Knyazev, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge, J. Cederkall, N. Keeley, K. Rusek, C. García-Ramos, T. Pérez, L. A. Acosta, A. A. Arokiaraj, M. Babo, T. Cap, N. Ceylan, G. De Angelis, A. Di Pietro, J. P. Fernández, P. Figuera, L. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, J. H. Jensen, B. Jonson, R. Kotak, T. Kurtukian, M. Madurga, G. Marquín-Durán, M. Munch, A. K. Orduz, R. Honório, A. Pakou, L. Peralta, A. Perea, R. Raabe, M. Renaud, K. Riisager, A. M. Sánchez-Benítez, J. Sánchez-Segovia, O. Sgouros, V. Soukeras, P. Teubig, S. Viñals, M. Wolinska-Cichocka, R. Wolski and J. Yang.  
*Study of the scattering of  $^{15}\text{C}$  at energies around the Coulomb barrier.*  
*Journal of Physics: Conference Series* **1643**, 012095(2020).
89. J. Park, R. Krücken, A. Blazhev, D. Lubos, R. Gernhäuser, M. Lewitowicz, S. Nishimura, D.S. Ahn, H. Baba, B. Blank, P. Boutachkov, F. Browne, I. Celikovic, G. De France, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovinazzo, N. Goel, M. Górska, H. Grawe, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G.D. Kim, Y.K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, G. Lorusso, K. Moschner, D. Murai, I. Nishizuka, Z. Patel, M.M. Rajabali, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, L. Sinclair, P.A. Söderström, K. Steiger, T. Sumikama, H. Suzuki and H. Takeda.  
*Spectroscopy of  $^{99}\text{Cd}$  and  $^{101}\text{In}$  from Beta Decays of  $^{99}\text{In}$  and  $^{101}\text{Sn}$ .*  
*Physical Review C* **102**, 1, 014304 (2020).
90. V. Pazy, L.M. Fraile, H. Mach, B. Olaizola, G.S. Simpson, A. Aprahamian, C. Bernards, J.A. Briz, B. Bucher, C.J. Chiara, Z. Dlouhý, I. Gheorghe, D. Ghita, P. Hoff, J. Jolie, U. Köster, W. Kurcewicz, R. Licg, N. Mgrginean, R. Mrginean, J.M. Régis, M. Rudigier, T. Sava, M. Stgnoi, L. Stroe and W.B. Walters.  
*Fast-timing study of Ga-81 from the beta decay of Zn-81.*  
*Physical Review C* **102**, 1, 014329 (2020).
91. M. Proctor, X. Xiao, R.V. Craster, S.A. Maier, V. Giannini and P.A. Huidobro.  
*Near-and far-field excitation of topological plasmonic metasurfaces.*  
*Photonics* **7**, 4, 81(2020).
92. Marie S. Rider, Maria Sokolikova, Stephen M. Hanham, Miguel Navarro-Cía, Peter D. Haynes, Derek K.K. Lee, Magdalena Daniele, Mariangela Cestelli Guidi, Cecilia Mattevi, Stefano Lupi and Vincenzo Giannini.  
*Experimental signature of a topological quantum dot.*  
*Nanoscale* **12**, 22817 (2020).
93. K. Riisager, M.J.G. Borge, J.A. Briz, M. Carmona-Gallardo, O. Forstner, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, A.G. Camacho, J.G. Johansen, B. Jonson, M.V. Lund, J. Lachner, M. Madurga, S. Merchel, E. Nacher, T. Nilsson, P. Steier, O. Tengblad and V. Vedia.  
*Search for beta-delayed proton emission from  $^{11}\text{Be}$ .*  
*European Physical Journal A* **56**, 3, 100 (2020).
94. R.J.G. Rubira, C.J.L. Constantino, J.C. Otero, and S. Sánchez-Cortés.  
*Abiotic degradation of s-triazine pesticides analyzed by surface-enhanced Raman scattering.*  
*Journal of Raman Spectroscopy* **51**, 2, 264-273 (2020).
95. Y. Saito, I. Dillmann, R. Krücken, N. Bernier, G.C. Ball, M. Bowry, C. Andreoiu, H. Bidaman, V. Bildstein, P. Boubel, C. Burbadge, R. Caballero-Folch, M.R. Dunlop, R. Dunlop, L.J. Evitts, F.H. Garcia, A.B. Garnsworthy, P.E. Garrett, H. Grawe, G. Hackman, S. Hallam, J. Henderson, S. Ilyushkin, A. Jungclaus, D. Kisliuk, J. Lassen, R. Li, E. Macconnachie, A.D. Maclean, E. McGee, M. Moukaddam, B. Olaizola, E. Padilla-Rodal, J. Park, O. Paetkau, C.M. Petrache, J.L. Pore, A.J. Radich, J. Ruotsalainen, J.K. Smallcombe, C.E. Smith, A. Svensson, J. Teigelhöfer, J. Turko and T. Zidar.  
*Decay spectroscopy of  $^{129}\text{Cd}$ .*  
*Physical Review C* **102**, 2, 024337 (2020).

96. Martin Schnedlitz, Daniel Knez, Maximilian Lasserus, Ferdinand Hofer, Ricardo Fernandez-Perea, Andreas W. Hauser, Maria Pilar de Lara-Castells and Wolfgang E. Ernst.  
*Thermally Induced Diffusion and Restructuring of Iron Triade (Fe, Co, Ni) Nanoparticles Passivated by Several Layers of Gold.*  
Journal of Physical Chemistry C **124**, 30, 16680-16688 (2020).
97. R. Shearman, G. Lorusso, A. Boso, P.H. Regan, S. Nishimura, Z.Y. Xu, A. Jungclaus, Y. Shimizu, G.S. Simpson, P.-A. Soderstrom, H. Watanabe, F. Browne, P. Doornenbal, G. Gey, H.S. Jung, B. Meyer, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, H. Baba, G. Benzoni, K.Y. Chae, F.C.L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhauser, N. Inabe, T. Isobe, T. Kajino, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kajouharov, F.G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, G.J. Lane, Z. Li, A. Montaner-Piza, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, H. Sakurai, H. Schaffner, P. Schury, S. Shibagaki, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, A. Yagi, K. Yoshinaga.  
*Determination of beta-delayed neutron emission probability limits of rhodium isotopes by gamma-ray spectroscopy.*  
Journal of Physics: Conference Series **1643**, 012208 (2020).
98. M. Siciliano, J.J. Valiente-Dobón, A. Goasduff, F. Nowacki, A.P. Zuker, D. Bazzacco, A. Lopez-Martens, E. Clément, G. Benzoni, T. Braunroth, F.C.L. Crespi, N. Cieplicka-Orynczak, M. Doncel, S. Ertürk, G. de France, C. Fransen, A. Gadea, G. Georgiev, A. Goldkuhle, U. Jakobsson, G. Jaworski, P.R. John, I. Kuti, A. Lemasson, T. Marchi, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, C. Müller-Gatermann, D.R. Napoli, J. Nyberg, M. Palacz, R.M. Pérez-Vidal, B. Saygi, D. Sohler, S. Szilner, D. Testov, M. Zielinska, D. Barrientos, B. Birkenbach, H.C. Boston, A.J. Boston, B. Cederwall, J. Collado, D.M. Cullen, P. Désesquelles, C. Domingo-Pardo, J. Dudouet, J. Eberth, V. González, A. Jungclaus and E. Sanchis.  
*Pairing-quadrupole interplay in the neutron-deficient tin nuclei: First lifetime measurements of low-lying states in  $^{106,108}\text{Sn}$ .*  
Physics Letters B **806**, 135474 (2020).
99. G.D. Soria, J.F. Marco, A. Mandziak, S. Sánchez-Cortés, M. Sánchez-Arenillas, J.E. Prieto, J. Dávalos, M. Foerster, L. Aballe, J. López-Sánchez, J.C. Guzmán-Mínguez, C. Granados-Miralles and J. De La Figuera, A. Quesada.  
*Influence of the growth conditions on the magnetism of  $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$  thin films and the behavior of  $\text{Co}/\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$  bilayers.*  
Journal of Physics D - Applied Physics **53**, 34, 344002 (2020).
100. M. Stryjczyk, B. Andel, A.N. Andreyev, J. Cubiss, J. Pakarinen, K. Rezykina, P. Van Duppen, S. Antalic, T. Berry, M.J.G. Borge, C. Clisu, D.M. Cox, H. De Witte, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, L.P. Gaffney, L.J. Harkness-Brennan, M. Huyse, A. Illana, D.S. Judson, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Lazarus, R. Lica, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, C. Mihai, P. Mosat, E. Nacher, A. Negret, J. Ojala, J.D. Ovejas, R.D. Page, P. Papadakis, S. Pascu, A. Perea, Z. Podolyák, V. Pucknell, E. Rapisarda, F. Rotaru, C. Sotty, O. Tengblad, V. Vedia, S. Viñals, R. Wadsworth, N. Warr and K. Wrzosek-Lipska.  
*Decay studies of the long-lived states in  $\text{Tl } 186$ .*  
Physical Review C **102**, 2, 024322 (2020).
101. Y.L. Sun, A. Obertelli, P. Doornenbal, C. Barbieri, Y. Chazono, T. Duguet, H.N. Liu, P. Navrátil, F. Nowacki, K. Ogata, T. Otsuka, F. Raimondi, V. Somà, Y. Utsuno, K. Yoshida, N. Achouri, H. Baba, F. Browne, D. Calvet, F. Château, S. Chen, N. Chiga, A. Corsi, M.L. Cortés, A. Delbart, J.M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, C. Hilaire, T. Isobe, T. Kobayashi, Y. Kubota, V. Lapoux, T. Motobayashi, I. Murray, H. Otsu, V. Panin, N. Paul, W. Rodriguez, H. Sakurai, M. Sasano, D. Steppenbeck, L. Stuhl, Y. Togano, T. Uesaka, K. Wimmer, K. Yoneda, O. Aktas, T. Aumann and V. Vaquero.  
*Restoration of the natural  $E(1/2+ 1) - E(3/2+ 1)$  energy splitting in odd- $K$  isotopes towards  $N = 40$ .*  
Physics Letters B **802**, 135215 (2020).
102. I. Syndikus, M. Petri, A.O. Macchiavelli, S. Paschalis, C.A. Bertulani, T. Aumann, H. Alvarez-Pol, L. Atar, S. Beceiro-Novo, J. Benlliure, J.M. Boillos, K. Boretzky, M.J.G. Borge, B.A. Brown, M. Caamaño, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, S. Chakraborty, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, E. Cravo, R. Crespo, U. Datta Pramanik, I. Dillmann, P. Díaz Fernández, Z. Elekes, J. Enders, F. Farinon, L.M. Fraile, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhäuser, P. Golubev, K. Göbel, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, M. Holl, H.T. Johansson, B. Jonson, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, T. Kröll, N. Kurz, C. Langer, E. Nacher, A. Perea, G. Ribeiro, O. Tengblad, Y. Togano, M. Vandebrouck, V. Volkov, et al.  
*Probing the  $Z=6$  spin-orbit shell gap with  $(p,2p)$  quasi-free scattering reactions.*  
Physics Letters B **809**, 135748 (2020).

103. Y.Y. Tanaka, P. Albella, M. Rahmani, V. Giannini, S.A. Maier and T. Shimura.  
*Plasmonic linear nanomotor using lateral optical forces.*  
Science Advances **6**, 45, 3726 (2020).
104. O. Tengblad, M. García Castaño and I. Marroquín.  
*Phoswich scintillator assemblies: Application to the Simultaneous detection of Particle and Gamma radiation – PASPAG.*  
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **463**, 415-417 (2020).
105. G. Vannucci, M.V. Cañamares, S. Prati, S and S. Sánchez-Cortés.  
*Study of the azo-hydrazone tautomerism of Acid Orange 20 by spectroscopic techniques: UV-Visible, Raman, and surface-enhanced Raman scattering.*  
Journal of Raman Spectroscopy **51**, 8, 1295-1304 (2020).
106. V. Vaquero, A. Jungclaus, T. Aumann, J. Tscheuschner, E.V. Litvinova, J.A. Tostevin, H. Baba, D.S. Ahn, R. Avigo, K. Boretzky, A. Bracco, C. Caesar, F. Camera, S. Chen, V. Derya, P. Doornenbal, J. Endres, N. Fukuda, U. Garg, A. Giaz, M.N. Harakeh, M. Heil, A. Horvat, K. Ieki, N. Imai, N. Inabe, N. Kalantar-Nayestanaki, N. Kobayashi, Y. Kondo, S. Koyama, T. Kubo, I. Martel, M. Matsushita, B. Million, T. Motobayashi, T. Nakamura, N. Nakatsuka, M. Nishimura, S. Nishimura, S. Ota, H. Otsu, T. Ozaki, et al.  
*Fragmentation of Single-Particle Strength around the Doubly Magic Nucleus  $^{132}\text{Sn}$  and the Position of the  $0f_{5/2}$  Proton-Hole State in  $^{131}\text{In}$ .*  
Physical Review Letters **124**, 2, 022501 (2020).
107. S. Viñals, M. J. G. Borge, O. Tengblad, E. Nácher, J. Benito, P. Figuera, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, A. Gad, J. Jensen, B. Jonson, R. Lica, I. Marroquín, M. Munch, T. Nilsson, J. D. Ovejas, A. Perea, K. Riisager, S. Smain and C. Sotty.  
*The experiments to determine the electron capture and  $\beta$ -decay of  $^8\text{B}$  into the highly excited states of  $^8\text{Be}$ .*  
Journal of Physics: Conference Series **1643**, 012130 (2020).
108. S. Viñals, E. Nácher, O. Tengblad, J. Benito, M.J.G. Borge, P. Figuera, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, A. Gad, J. Jensen, B. Jonson, R. Lica, I. Marroquín, M. Munch, T. Nilsson, J.D. Ovejas, A. Perea, K. Riisager, S. Smain and C. Sotty.  
*The most accurate determination of the  $^8\text{B}$  half-life.*  
Acta Physica Polonica B **51**, 3, 717-723 (2020).
109. K. Wimmer, T. Arici, W. Korten, P. Doornenbal, J.P. Delaroche, M. Girod, J. Libert, T.R. Rodríguez, P. Aguilera, A. Algora, T. Ando, H. Baba, B. Blank, A. Boso, S. Chen, A. Corsi, P. Davies, G. de Angelis, G. de France, D.T. Doherty, J. Gerl, R. Gernhäuser, T. Goigoux, D. Jenkins, G. Kiss, S. Koyama, T. Motobayashi, S. Nagamine, M. Niikura, S. Nishimura, A. Obertelli, D. Lubos, V.H. Phong, B. Rubio, E. Sahin, T.Y. Saito, H. Sakurai, L. Sinclair, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, V. Vaquero, R. Wadsworth, J. Wu, and M. Zielinska.  
*Shape coexistence revealed in the  $N=Z$  isotope  $^{72}\text{Kr}$  through inelastic scattering.*  
European Physical Journal A **56**, 6, 159 (2020).
110. M. Wu, S.T. Ha, S. Shendre, E.G. Durmusoglu, W.K. Koh, D.R. Abujetas, J.A. Sánchez-Gil, R. Paniagua-Domínguez, H.V. Demir and A.I. Kuznetsov.  
*Room-Temperature Lasing in Colloidal Nanoplatelets via Mie-Resonant Bound States in the Continuum.*  
Nano Letters **20**, 8, 6005-6011 (2020).
111. R. Zazo, J. Solis, J.A. Sanchez-Gil, R. Ariza, R. Serna and J. Siegel.  
*Deep UV laser induced periodic surface structures on silicon formed by self-organization of nanoparticles.*  
Applied Surface Science **520**, 146307 (2020).

### 6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

112. A. Chatain, M. Jiménez-Redondo, L. Vettier, O. Guaitella, N. Carrasco, L. L. Alves, L. Marques, G. Cernogora.  
 *$N_2$ - $H_2$  capacitively coupled radio-frequency discharges at low pressure. Part I. Experimental results.*  
Plasma Sources Science and Technology. **29**, pp. 085019 (2020).

113. Francisco Colmenero.  
*Thermodynamic properties of the uranyl carbonate minerals roubaultite, fontanite, widenmannite, grimselite, cejkaite and bayleyite.*  
Inorganic Chemistry Frontiers **7**, 4160-4179 (2020).
114. Francisco Colmenero.  
*Organic acids under pressure: elastic properties, negative mechanical phenomena and pressure induced phase transitions in the lactic, maleic, succinic and citric acids.*  
Materials Advances **1**, 1399-1426 (2020).
115. F. Colmenero, J. Plasil, I. Nemeč.  
*Uranosphaerite: Crystal structure, hydrogen bonding, mechanics, infrared and Raman spectroscopy and thermodynamics.*  
Journal of Physics and Chemistry of Solids **141**, 109400 (2020).
116. F. Colmenero, J. Plasil, P. Skacha.  
*The magnesium uranyl tricarbonate octadecahydrate mineral, bayleyite: Periodic DFT study of its crystal structure, hydrogen bonding, mechanical properties and infrared spectrum.*  
Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy **234**, 118216 (2020).
117. F. Colmenero, J. Plasil, J. Sejkora.  
*The crystal structures and mechanical properties of the uranyl carbonate minerals roubaultite, fontanite, sharpite, widenmannite, grimselite and cejkaite.*  
Inorganic Chemistry Frontiers **7**, 4197-4221 (2020).
118. F. Colmenero, J. Sejkora, J. Plasil.  
*Crystal Structure, Infrared Spectrum and Elastic Anomalies in Taperssuatsiaite.*  
Scientific Reports **10**, 7510 (2020).
119. F. Colmenero, J. Plášil, V. Timón, J. Cejka  
*Full crystal structure, hydrogen bonding and spectroscopic, mechanical and thermodynamic properties of mineral uranopilite.*  
RSC Advances **10**, 31947-31960 (2020).
120. Francisco Colmenero and Vicente Timón.  
*Extreme negative mechanical phenomena in the zinc and cadmium anhydrous metal oxalates and lead oxalate dehydrate.*  
Journal of Materials Science **55**, 218-236 (2020).
121. J. L. Doménech, O. Asvany, C. R. Markus, S. Schlemmer, S. Thorwirth.  
*High-resolution infrared action spectroscopy of the fundamental vibrational band of CN<sup>+</sup>.*  
Journal of Molecular Spectroscopy, **374**, 111375 (2020).
122. P.C. Gómez, M. Satorre Aznar, R. Escribano.  
*Density and porosity of amorphous water ice by DFT methods.*  
Chemical Physics Letters **745**, 137222 (2020).
123. M. Jiménez-Redondo, A. Chatain, O. Guaitella, G. Cernogora, N. Carrasco, L. L. Alves, L. Marques.  
*N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> capacitively coupled radio-frequency discharges at low pressure. Part II. Modelling results: the relevance of plasma-surface interaction.*  
Plasma Sources Science and Technology **29**, pp. 085023 (2020).
124. Martínez, G. Santoro, P. Merino, M. Accolla, K. Lauwaet, J. Sobrado, H. Sabbah, R. J. Pelaez, V. J. Herrero, I. Tanarro, J. I. Martínez, M. Agundez, A. Mayoral, A. Martín, R. Otero, P. de Andrés, G. J. Ellis, C. Joblin, J. Cernicharo, J. A. Martín-Gago.  
*Prevalence of non-aromatic carbonaceous molecules in the inner regions of circumstellar envelopes.*  
Nature Astronomy, **4** (1), 97-105 (2020).
125. B. Maté, S. Cazaux, M. A. Satorre, G. Molpeceres, J. Ortigoso, C. Millán, C. Santonja.  
*Diffusion of CH<sub>4</sub> in amorphous solid water.*  
Astronomy and Astrophysics, **643**, A163L (2020).

126. S. Montero, G. Tejeda, and J. M. Fernández.  
*Laboratory Study of Rate Coefficients for H<sub>2</sub>:H<sub>2</sub> Inelastic Collisions between 295 and 20 K.*  
Astrophysical Journal Supplement Series **247**, 14 (14pp) (2020).
127. G. Santoro, L. Martínez, K. Lauwaet, M. Accolla, G. Tajuelo-Castilla, P. Merino, J. M. Sobrado, R. J. Peláez, V. J. Herrero, I. Tanarro, A. Mayoral, M. Agúndez, H. Sabbah, C. Joblin, J. Cernicharo, J. A. Martín-Gago.  
*The chemistry of cosmic dust analogues from C, C<sub>2</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> in C-rich circumstellar envelopes.*  
The Astrophysical Journal, **859:97**, 13 pp (2020).
128. Franck Thibault, Raúl Z. Martínez, Dionisio Bermejo and Piotr Wcisło.  
*Line-shape parameters for the first rotational lines of HD in He.*  
Molecular Astrophysics **19**, 100063 (2020).

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

129. A. Schottelius, F. Mambretti, A. Kalinin, B. Beyersdorff, A. Rothkirch, C. Goy, J. Müller, N. Petridis, M. Ritzer, F. Trinter, J. M. Fernández, T. A. Ezquerro, D. E. Galli, R. E. Grisenti.  
*Crystal Growth Rates in Supercooled Atomic Liquid Mixtures.*  
Nature Materials **19**, 512-516 (2020).

**6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

130. F. Ania, M.A. Gómez-Fatou, H.J. Salavagione, P. Enrique-Jiménez, S. Quiles-Díaz, A. Flores.  
*Creep behaviour of elastomeric nanocomposites by flat punch indentation: Influence of graphene modification and content.*  
Composites Science and Technology **198**, 108311 (2020).
131. D. Cangialosi, A. Nogales.  
*Glass transition and crystallization in colloidal polymer nanoparticles.*  
RSC Soft Matter **2020-January** (9), 263-288 (2020).
132. J.M. Campos, B. del Río, V. Lorenzo, F. Ania, A. Barros-Timmons, M.R. Ribeiro.  
*Improvement of viscoelastic, elastic and plastic properties of Poly(L-lactide)/Graphene Oxide-Graft-Poly(L-lactide) nanocomposites by modulation of grafted chain length.*  
Composites Science and Technology **199**, 108350 (2020).
133. S. Dortéz, F. Fernández-Palacio, J. Damián, C. Gaiteiro, J. Ramos, P. Gómez-Sal, M.E.G. Mosquera.  
*Halogen bonding (HaB) in E-I··X-M systems: influence of the halogen donor on the HaB nature.*  
CrystEngComm **22**, 870-877 (2020).
134. M. Fernández-Regúlez, E. Solano, L. Evangelio, S. Gottlieb, C. Pinto-Gómez, G. Rius, J. Fraxedas, E. Gutiérrez-Fernández, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, F. Pérez-Murano.  
*Self-assembly of block copolymers under non-isothermal annealing conditions as revealed by grazing-incidence small-angle X-ray scattering.*  
Journal of Synchrotron Radiation **27**, 1278-1288 (2020).
135. G. Guidotti, M. Soccio, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, V. Siracusa, E. Gutiérrez-Fernández, A. Munari A, N. Lotti.  
*Fully Biobased Superpolymers of 2,5-Furandicarboxylic Acid with Different Functional Properties: From Rigid to Flexible, High Performant Packaging Materials.*  
ACS Sustainable Chemistry and Engineering **8**, 9558-9568 (2020).
136. E. Gutiérrez-Fernández, I. Gabaldón-Saucedo, A. Rodríguez-Rodríguez, E. Solano, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Cirera, T.A. Ezquerro, E. Rebollar.  
*Laser nanostructuring of thin films of PEDOT:PSS on ITO: morphology, molecular structure and electrical properties.*  
Applied Surface Science **509**,145350 (2020).

137. I Irska, S. Paszkiewicz, K. Goracy, A. Linares, T.A. Ezquerra, R. Jedrzejewski, Z. Roslaniec, E. Piesowicz. *Poly(butylene terephthalate)/polylactic acid based copolyesters and blends: miscibility-structure-property relationship*. Express Polymer Letters **14**(1) 26-47 (2020).
138. J. Prada-Rodrigo, R.I. Rodríguez-Beltrán, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, T.A. Ezquerra, P. Moreno, E. Rebollar. *Laser-Induced Periodic Surface Structuring of Poly(trimethylene terephthalate) Films Containing Tungsten Disulfide Nanotubes*. Polymers **12**(5), 1090 (2020).

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

A. Schottelius, F. Mambretti, A. Kalinin, B. Beyersdorff, A. Rothkirch, C. Goy, J. Müller, N. Petridis, M. Ritzer, F. Trinter, J. M. Fernández, T. A. Ezquerra, D. E. Galli, R. E. Grisenti. *Crystal Growth Rates in Supercooled Atomic Liquid Mixtures*. Nature Materials **19**, 512-516 (2020).

**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. Sarriguren, E. Moya de Guerra. *Symmetry Energy, its components and nuclear structure properties at finite temperature*. AAPPS Bulletin, vol. 30, N. 2, p. 82 (2020). Association of Asia Pacific Physical Societies (South Korea). DOI: 10.22661/AAPPSBL.2020.30.2.8
2. J. Mur-Petit, A. Relaño, R.A. Molina, D. Jaksch. *Fluctuations of work in realistic equilibrium state of quantum systems with conserved quantities*. Proceedings of the 24<sup>th</sup> European Few Body Conference. SciPost Physics Proceedings **3**, 024 (2020).

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

3. Y. Francescato, S. R. Pockock, and V. Giannini. *On the Non-Local Surface Plasmons' Contribution to the Casimir Force between Graphene Sheets*. Physics, **2**, 1, 22-31 (2020).
4. S. J. Palmer and V. Giannini. *Peacock.jl: Photonic crystals in Julia*. Journal of Open Source Software, **5**, 54, 2678(2020).

**6.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**

5. P.M. De Salazar, J. Ramos, V.L. Cruz, R. Polo, J. del Amo, J. Martínez-Salazar. *Tenofovir and remdesivir ensemble docking with the SARS-CoV-2 polymerase and template-nascent RNA*. Authorea Preprints. September 28, 2020. DOI: [10.22541/au.160133726.63184055](https://doi.org/10.22541/au.160133726.63184055)

## 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. M.J. Costa, R. Schödel, S. Heinemeyer, A. Calderon, A. Casas, A. Vicente, P. Hernández Gamazo, L. Tolós, R. Vilar, M. Croce, J.M. Vílchez Medina, J.M. Mas-Hesse, F. Najarro, J.R. Goicoechea, T. Ortín Miguel, G. Calcagni, C. Lacasta Llácer, L. Fàbrega, A. Enciso, F. Marchesano, N. Rea, M.A. Pérez-Torres.  
*Understanding the basic components of the Universe, its structure and evolution. Libro Blanco CSIC 9.*  
Editorial CSIC, Madrid (2020).  
DOI: 10.20350/digitalCSIC/12656
2. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, D.N. Kadrev, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.  
*Nuclear Symmetry Energy in Finite Nuclei.*  
Nuclear Structure Physics (Eds. A. Shukla, S. K. Patra), Ch. 4, p. 93 (2020).  
CRC Press (Taylor and Francis Group), Florida (USA).  
DOI: 10.1201/9780429288647  
ISBN: 9780367256104

#### 6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

3. V. J. Herrero, B. Maté, I. Tanarro, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, R. Escribano.  
*Desorption of volatile molecules from the surface of interstellar carbonaceous dust analogs.*  
Proceedings of the International Astronomical Union.  
Farid Salama and Harold Linnartz (eds), Cambridge University Press, 2020.  
ISBN-10: 1108482473

#### 6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

4. T.A. Ezquerra, A. Nogales (Eds.).  
*Crystallization as Studied by Broadband Dielectric Spectroscopy.*  
Advances in Dielectrics, Series.  
Springer Nature Switzerland AG 2020. ISBN 978-3-030-56185-7 (2020).
5. A. Nogales, T.A. Ezquerra, M. Soccio, M. Hernández Santana.  
*Order and Dielectric Relaxation During Polymer Crystallization.*  
Crystallization as Studied by Broadband Dielectric Spectroscopy. T.A. Ezquerra, A. Nogales (Eds.),  
p. 195-220 (2020).  
Advances in Dielectrics, Series.  
Springer Nature Switzerland AG 2020. ISBN 978-3-030-56185-7 (2020).
6. D. Cangialosi, A. Nogales.  
*Glass Transition and Crystallization in Colloidal Polymer Nanoparticles.*  
Polymer Colloids: Formation, Characterization and Applications' (Ed. by Rodney Priestley, Robert Prud'homme).  
The Royal Society of Chemistry: ISBN:978-1-78801-417-5.  
Chapter 8, pp 263-268 (2020).
7. Aguilera, V. Souza-Egipsy and E. González-Toril, E.  
*La vida en Río Tinto.*  
INTA. Ministerio de Defensa. Madrid. 96 pp. ISBN: 978-84-9091-517-2 (2020).



## 6.4 TESIS DOCTORALES PH.D. THESES

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

**Title:** Interacciones gravitacionales en modelos de materia oscura  
**University:** Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid  
**Date:** December 2020  
**Mark:** Sobresaliente “cum laude”  
**Candidate:** José M. Sánchez Velázquez  
**Supervisor:** J. A. R. Cembranos and L.J. Garay

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

**Title:** Desintegración beta del  $^8\text{B}$  a los estados excitados del  $^8\text{Be}$ : contribuciones en mezcla de isospín y halo de protón  
**University:** Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid  
**Date:** 11<sup>th</sup> of December 2020  
**Mark:** Sobresaliente “cum laude”  
**Candidate:** Silvia Viñals Onses  
**Supervisor:** Enrique Nacher y Olof Tengblad

**Title:** Nanofotónica de estructuras dieléctricas de alto índice de refracción: resonancias ópticas en metasuperficies y nanohilos semiconductores  
**University:** Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma de Madrid  
**Date:** 15<sup>th</sup> of December 2020  
**Mark:** Sobresaliente “cum laude”  
**Candidate:** Diego Romero Abujetas  
**Supervisor:** Jose Antonio Sánchez Gil

## 6.5 TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES MASTER, GRADE AND OTHER DEGREES THESES

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

**Title:** Magnetic form factors of odd-A nuclei from elastic electron scattering  
**Type:** Master thesis  
**University:** Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid  
**Date:** 14 September 2020  
**Mark:** Sobresaliente. Matrícula de Honor  
**Candidate:** Beatriz Hernández Molinero  
**Supervisor:** Pedro Sarriguren Suquilbide

**Title:** The Effective Mass for Cosmological Perturbations in the Dapor--Liegener Model of Loop Quantum Cosmology  
**Type:** Master thesis  
**University:** Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid  
**Date:** July 2020  
**Candidate:** Gabriel Sánchez Pérez  
**Supervisor:** Guillermo Antonio Mena Marugán

**Title:** Estructura microscópica del vacío  
**Type:** Master thesis  
**University:** Universidad Complutense de Madrid  
**Date:** July 2020  
**Candidate:** Germán Segura  
**Supervisor:** J. A. R. Cembranos and Luis J. Garay

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

*Title:* Development of sensitive nano-spectroscopic methods for the in-situ analysis of synthetic colorants in textiles.

*Type:* **Master thesis**

*University:* Università di Bologna (Italy)

*Date:* 28<sup>th</sup> April 2020

*Mark:* Sobresaliente “cum laude”

*Candidate:* **Jessica Rampazzo**

*Supervisor:* **Santiago Sánchez Cortés/Silvia Prati**

*Title:* **Studio di inchiostri ferro-gallici per spettroscopia Raman**

*Type:* **Grade thesis**

*University:* Università di Venezia (Italy)

*Date:* 8<sup>th</sup> of August 2020

*Mark:* Sobresaliente “cum laude”

*Candidate:* **Salvatore Caterino**

*Supervisor:* **Santiago Sánchez Cortés/Claudia Crestini**

### 6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

*Title:* **Simulación molecular de mezclas para facilitar el reciclado de plásticos**

*Type:* **Master thesis**

*University:* Universidad Internacional Menéndez Pelayo

*Date:* 20<sup>th</sup> of July 2020

*Mark:* Sobresaliente

*Candidate:* **Marianela Gómez Toledo**

*Supervisor:* **Javier Ramos Díaz**

**Capítulo 7**  
**TABLAS Y DATOS**

*Chapter 7*  
*TABLES AND DATA*

## 7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
Number of ISI publications	179	187	155	159	148	146	156	156
Number of non-ISI publications	13	18	16	4	3	2	3	3
Total stock of PhD fellowships and contracts	22	22	18	16	18	17	19	19
Number of PhD Theses defended	5	8	7	8	4	4	3	3
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	82,4	32,9	88	89	57,3	87	171	89,2

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

JOURNAL	IMPACT FACTOR (JCR -2019)	NUMBER OF PAPERS
Nature Materials	38.663	1
Science Advances	13.117	1
Nature Communications	12.121	1
Nature Astronomy	11.518	1
Nano Letters	11.238	2
Physical Review Letters	8.385	9
Astrophysical Journal, Supplement Series	7.950	1
ACS Sustainable Chemistry and Engineering	7.632	1
Composites Science and Technology	7.094	2
Nanoscale	6.895	1
ACS Photonics	6.864	3
Applied Surface Science	6.182	2
Inorganic Chemistry Frontiers	5.958	2
Journal of High Energy Physics	5.875	3
Astrophysical Journal	5.746	1
Astronomy and Astrophysics	5.636	1
Physical Review D	4.833	6
APPLIED CLAY SCIENCE	4.605	1
PHYSICS LETTERS B	4.384	5
Journal of Physical Chemistry C	4.189	1
Scientific Reports	3.998	1
Optics Express	3.669	1
Physical Review B	3.575	9
Journal of Materials Science	3.553	1
Journal of Physics and Chemistry of Solids	3.442	1
Physical Chemistry Chemical Physics	3.430	1
Polymers	3.426	1
Spectrochimica Acta - Part A	3.232	1
Plasma Sources Science and Technology	3.193	2
Journal of Physics D - Applied Physics	3.169	1

RSC Soft Matter	3.140	1
RSC Advances	3.119	1
CrystEngComm	3.117	1
Express Polymer Letters	3.083	1
Classical and Quantum Gravity	3.071	1
PHYSICAL REVIEW C	2.988	18
Physical Review A	2.777	1
Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal	2.705	1
Agronomy-Basel	2.603	1
Journal of Molecular Structure	2.463	1
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics	2.415	1
Minerals	2.380	1
Physical Review E	2.296	1
Journal of Synchrotron Radiation	2.251	1
European Physical Journal A	2.176	3
Photonics	2.140	1
Metals	2.117	1
Frontiers in Psychology	2.067	1
General Relativity and Gravitation	2.030	1
Chemical Physics Letters	2.029	1
Journal of Sol-Gel Science and Technology	2.008	1
Journal of Raman Spectroscopy	2.000	4
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	1.996	1
Chemical Physics	1.771	1
Universe	1.752	1
Mathematics	1.747	1
Nuclear Physics A	1.695	1
European Physical Journal B	1.347	1
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B	1.270	1
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1.265	2
Journal of Molecular Spectroscopy	1.229	1
Advances in Applied Mathematics	0.952	1
Comptes Rendus Mathematique	0.719	1
Acta Physica Polonica B	0.651	2
Frontiers in Astronomy and Space Sciences	0	1
Journal of Physics: Conference Series	0	10
Materials Advances	0	1
Molecular Astrophysics	0	1
Physical Review Research	0	3
<b>TOTAL:</b>	<b>Average Impact Factor: 4,44</b>	<b>138</b>

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

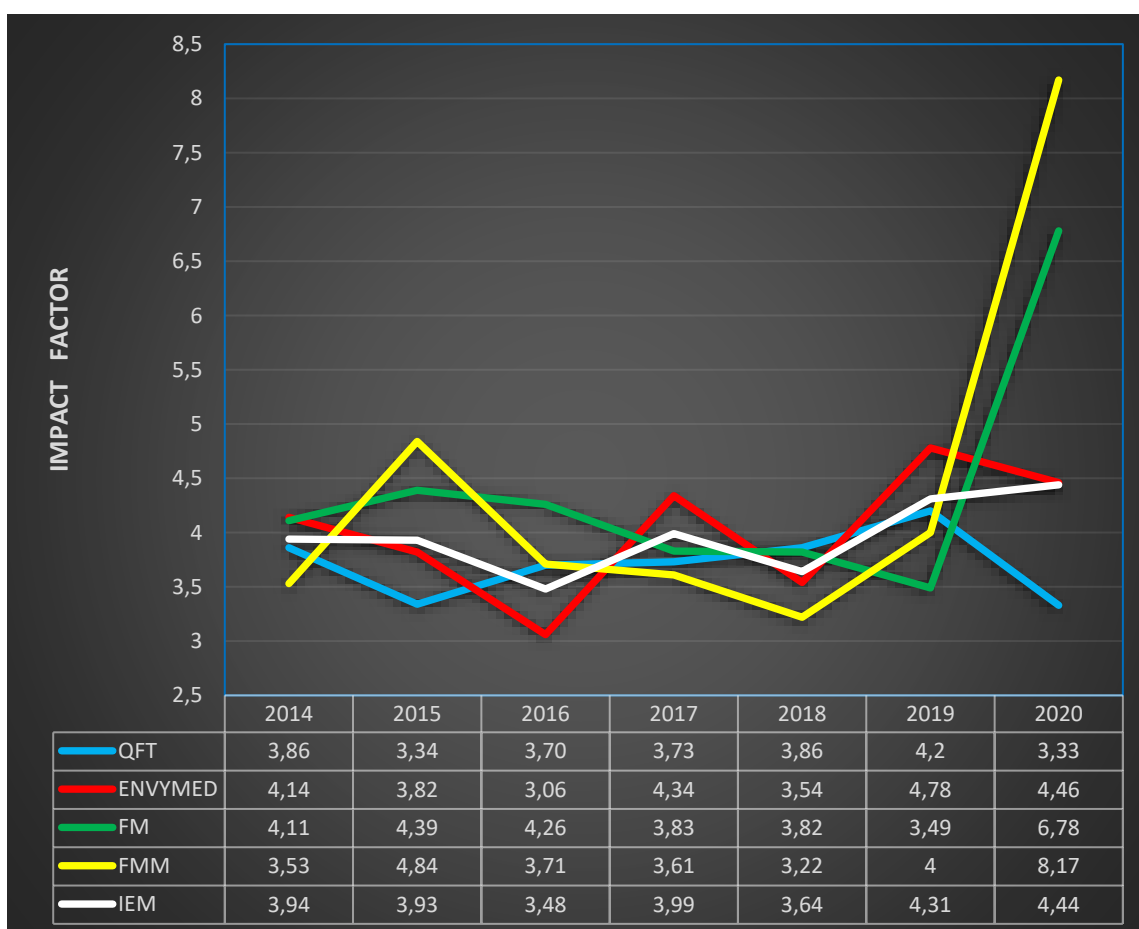
#### Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (**QFT**)

Molecular Physics (**FM**)

Macromolecular Physics (**FMM**)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (**ENVYMED**)



## 7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS PERSONNEL BY DEPARTMENTS

Department	Scientific Staff		"Ramón & Cajal"		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel <sup>1</sup>		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
<b>QFT</b>	8	1			1		3				12	1	<b>13</b>
<b>ENVYMED</b>	6	4		1		2	9	1	1	2	16	10	<b>26</b>
<b>FM</b>	9	2			1		2		2		14	2	<b>16</b>
<b>FMM</b>	6	4							1	1	7	5	<b>12</b>
<b>ADMON.</b>									2	9	2	9	<b>11</b>
<b>IEM</b>		<b>11</b>		<b>1</b>	<b>29</b>	<b>2</b>	<b>14</b>	<b>1</b>	<b>6</b>	<b>12</b>	<b>51</b>	<b>27</b>	<b>78</b>

<sup>1</sup>"Authorized Stay" excluded

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

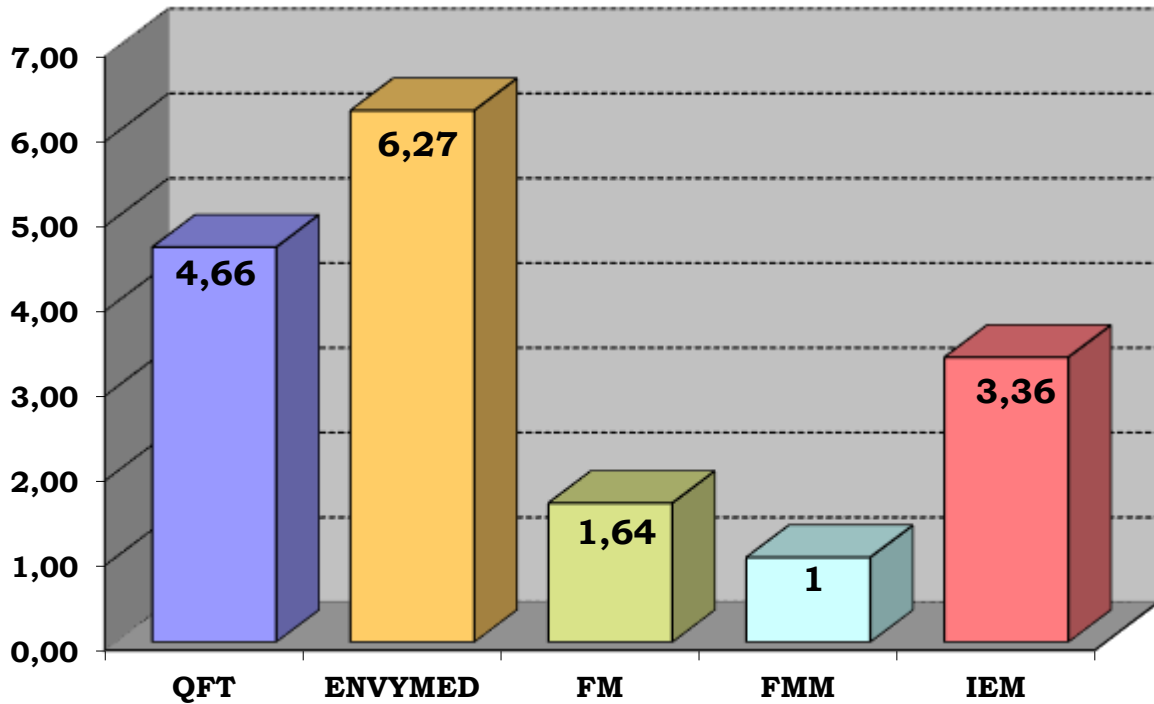
**Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados /  
Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 74**

## 7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

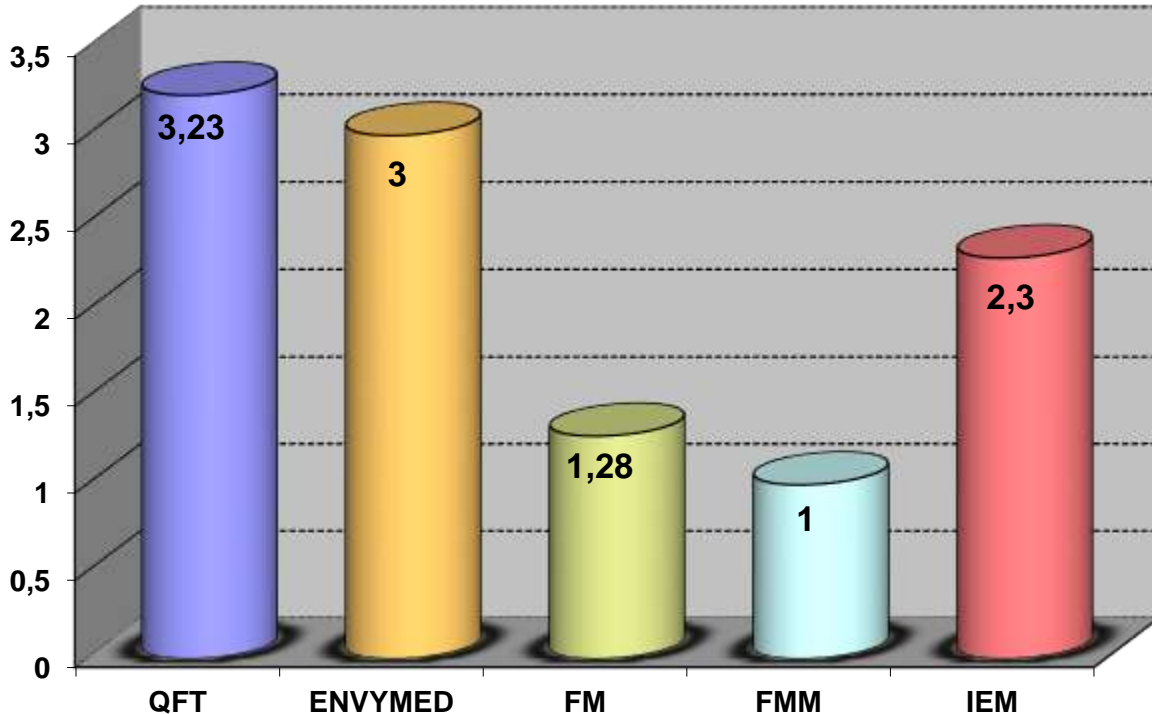
	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
<b>ISI publications</b>	<b>42</b>	<b>69</b>	<b>17 (+1)<sup>1</sup></b>	<b>9 (+1)<sup>1</sup></b>	<b>138</b>
<b>Other publications</b>	<b>2</b>	<b>2</b>		<b>1</b>	<b>5</b>

<sup>1</sup>In parenthesis, papers shared with other Departments.

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



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



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

- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior (plantilla): 3,45**  
 Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher