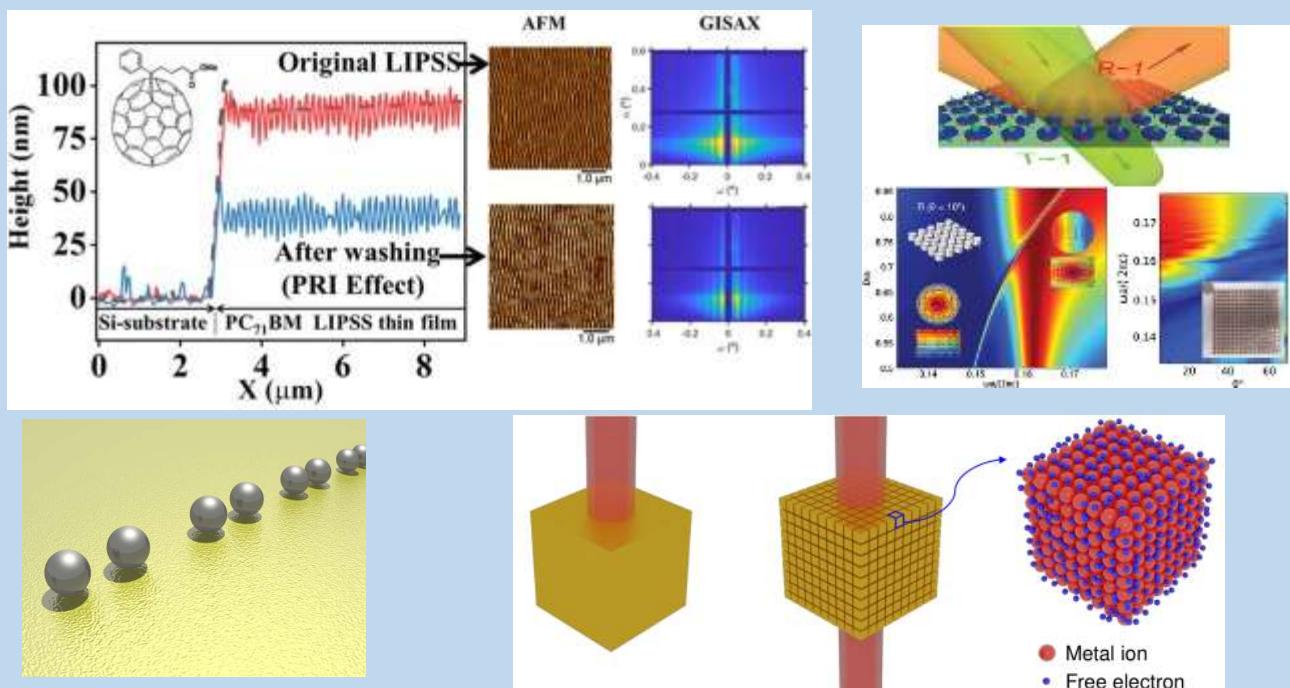


Instituto de Estructura de la Materia

Memoria 2021

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Annual Report 2021



MEMORIA ANUAL 2021

SCIENTIFIC REPORT 2021

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

SUMARIO

Introducción	6
<i>Introduction</i>	7
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	8
Dirección / Direction	9
Junta de Instituto / Institute Board	9
Claustro Científico / Scientific Staff.....	10
Departamentos de Investigación / Research Departments	11
Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	11
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	12
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	13
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	14
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	15
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	15
2A. Labor Investigadora	16
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	17
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	23
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	36
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	40
2B. Research Activities.....	45
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department	46
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department.....	52
2B.3 Molecular Physics Department	65
2B.4 Macromolecular Physics Department.....	69
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	73
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	76
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	78
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	79

4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	81
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	82
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	82
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	83
4.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	85
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	86
4.2 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	86
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	86
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	86
4.3 Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreing Institutions	87
4.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	87
5 Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	88
5.1 Docencia / Teaching	89
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	89
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	89
5.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	90
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	90
5.2 Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	90
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	90
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	91
5.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	91
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	91
5.3 Premios y Otros Méritos / Awards.....	91
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	91
5.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	92
5.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	92
5.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	92

5.4 Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	93
5.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	93
5.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	94
5.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	94
5.4.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	95
5.5 Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	95
5.5.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	95
5.5.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	96
5.6 Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	96
5.6.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	96
5.6.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	97
5.6.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	97
5.6.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	97
6. Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	98
6.1 Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	99
6.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	99
6.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	102
6.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	108
6.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	109
6.2 Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	111
6.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	111
6.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	111
6.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	112
6.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	112
6.3 Tesis Doctorales / PhD Theses.....	113
6.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	113
6.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	113

6.4 Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones / Master, Grade and Other Degrees Theses....	113
6.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	113
6.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	114
6.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	115
7. Tablas y Datos / Tables and Data	116
7.1 Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	117
7.2 Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	117
7.3 Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	119
7.4 Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	120
7.5 Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments.....	120
7.6 Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	121

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 2021, 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 2021 en 134 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 2021, 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 2021, has crystallized in 134 ISI publications.

Capítulo 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

Chapter 1
INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / DIRECTION (HASTA EL 7 DE OCTUBRE / UNTIL OCTOBER 7TH)

Director/Director: Dr. Guillermo A. Mena Marugán

Vicedirector 1º/Assistant Director 1st: Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Vicedirector 2º/Assistant Director 2nd: Dr. José M. Fernández Sánchez

Gerente/Manager: D^a. Isabel Llerena de Frutos

DIRECCIÓN / DIRECTION (DESDE EL 8 DE OCTUBRE / SINCE OCTOBER 8TH)

Director / Director: Prof. Tiberio Ezquerra Sanz

Vicedirector 1º/Assistant Director 1st: Dr. Rafael A. Molina Fernández

Vicedirectora 2ª/Assistant Director 2nd: Dra. M^a Luisa Senent Diez

Gerente/Manager: D^a. Isabel Llerena de Frutos

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente / President: Dr. Guillermo A. Mena Marugán (*hasta/until 7-10-21*)

Presidente / President: Prof. Tiberio Ezquerra Sanz (*desde/since 8-10-21*)

Secretaria / Secretary: D^a. Isabel Llerena de Frutos

Vocales / Members:

Dr. José Carlos Canalda Cámara (*hasta/until 28-11-21*)

Prof. Tiberio Ezquerra Sanz (*hasta/until 7-10-21*)

Dr. José M. Fernández Sánchez (*hasta/until 7-10-21*)

Prof^a. M^a José García Borge (*hasta/until 24-10-21*)

Prof. José González Carmona (*hasta/until 24-10-21*)

Dra. M^a Belén Maté Naya (*hasta/until 24-10-21*)

Dr. Rafael Molina Fernández (*hasta/until 28-11-21*)

D. Miguel Ángel Moreno Alba (*hasta/until 28-11-21*)

Dr. Juan Francisco Vega Borrego (*hasta/until 24-10-21*)

Vocales / Members:

Dr. Carlos Cabrillo (*desde/since 25-10-21*)

D^a. M^a Carmen García Collado (*desde/since 29-11-21*)

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez (*desde/since 25-10-21*)

Dr. Eduardo Garrido Bellido (*desde/since 29-11-21*)

Dr. Guillermo A. Mena Marugán (*desde/since 25-10-21*)

Dr. Rafael A. Molina Fernández (*desde/since 9-10-21*)

Dra. Aurora Nogales Ruiz (*desde/since 29-11-21*)

Dra. M^a Luisa Senent Diez (*desde/since 9-10-21*)

Dr. Guzmán Tejeda Gala (*desde/since 25-10-21*)

Dr. Vicente Timón Salinero (*desde/since 29-11-21*)

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF**Presidente / President:** Dr. Guillermo A. Mena Marugán (*hasta/until* 7-10-21)**Presidente / President:** Prof. Tiberio Ezquerra Sanz (*desde/since* 8-10-21)**Secretario / Secretary:** Dr. Vincenzo Giannini**Personal Investigador / Scientific staff:**

Dr. J. Fernando Barbero González

Dr. José Ántonio Briz Monago

Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. Mª 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

Profª. 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. Mª 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. Ramón Javier Peláez de Fuentes

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Christophe Rappold

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Prof. Pedro Sarrieguren Suquilbide

Dra. Mª Luisa Senent Diez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Prof. Olof E. I. Tengblad

Dr. Vicente Timón Salinero

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Dra. Kathrin Wimmer

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación (hasta 24 de octubre) /
Research Professor (until October 24th)

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico (desde 25 de octubre) /
Research Scientist (since October 25th)

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación (jubilación 23 de abril) /
Research Professor (retired on April 23rd)

Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dr. Jesús Fernando Barbero González
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dra. María Luisa Senent Diez
Dr. Gianluca Calcagni
Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández

Profesor de Investigación “Ad Honorem” /
(desde 24 de abril / since April 24th)
Profesor de Investigación / *Research Professor*
Investigador Científico / *Research Scientist*
Investigador Científico / *Research Scientist*
Investigadora Científica/ *Research Scientist*
Científico Titular / *Tenured Scientist*
Científico Titular/ *Tenured Scientist*

D. Alejandro García-Quismondo Martín
D. Ángel López Corps

Contratado Predoctoral (La Caixa) / *PhD Fellowship*
Contratado Predoctoral (La Caixa) (desde 16 de octubre) /
PhD Fellowship (since October 16th)

D. Álvaro Rubio García

Contratado Predoctoral FPI (hasta 30 de abril) /
PhD Fellowship (until April 30th)

D. Santiago Prado Loy
Dra. Eslem Ben Chouikha
D. Rafael Jiménez Llamas

Otros (Estudiante de Doctorado) / Others (*PhD Student*)
Estancia Temporal / *Authorized Stay*
Estancia Temporal / *Authorized Stay*

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

Jefa del Departamento / Head of Department:

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico (desde 25 de octubre) /

Research Scientist (since October 25th)

Prof. M^a José García Borge

Profesora de Investigación (hasta 24 de octubre) /

Research Professor (until October 24th)

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

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. M^a 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 R&C (hasta 15 de julio) /

Tenure Track Contract R&C (until July 15th)

Dr. Christophe Marie Jean Rappold

Postdoctoral Atracción Talento Investigador CM /

Postdoc Contract

Dr. José Antonio Briz Monago

Postdoctoral - Contratado cargo a proyecto (hasta 9 de

noviembre) / *Project Postdoc Contract (until November 9th)*

Dra. Ana Crespo Ibáñez

Contratada Personal Tec. de Apoyo (desde 1 de diciembre) /

PTA Contract (since December 1st)

D. Jaime Acosta Loza

Titulado Superior Contratado cargo a proyecto (desde 16

de mayo) / *University Graduate (since May 16th)*

D. Álvaro Fernández Martínez

Titulado Superior Contratado C/P (hasta 15 de abril) /

University Graduate (until April 15th)

D. Vicente García Távora

Titulado Superior Contratado C/P / *University Graduate*

D. Álvaro Buendía Gallego

Contratado Predoctoral FPI / *PhD Fellowship FPI*

D. Javier Díaz Ovejas

Contratado Predoctoral FPI (hasta 15 de septiembre) /

PhD Fellowship FPI (until September 15th)

D. Daniel Fernández Ruiz

Contratado Predoctoral FPI (desde 1 de septiembre) /

PhD Fellowship (since September 1st)

D. Samuel Escrig López

Contratado Predoctoral CM / *PhD Fellowship CM*

D^a Andriana Fardi

Estancia Temporal - Erasmus+ / *Authorized Stay*

D^a Michela Rampa

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

D^a Kabonire Ruhinda

Estancia Temporal - Erasmus+ / *Authorized Stay*

D^a Caterina Zaggia

Estancia Temporal - Erasmus+ / *Authorized Stay*

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Superior Especializado OPIS / *Especialized*

University Graduate

D^a. Purificación Corchete Corchete

Ayudante Investigación OPIS (hasta 24 de junio) /

Research Assistant OPIS (until June 24th)

D^a. Jessica Roldán Coronel

Contrato GARJUR / *Contract GARJUR*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR MOLECULAR PHYSICS

Jefa del Departamento / Head of Department:

Dra. M^a Belén Maté Naya

Científica Titular (hasta 24 de octubre) /

Tenured Scientist (until October 24th)

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular (desde 25 de octubre) /

Tenured Scientist (since October 25th)

Personal Científico / Research Staff:

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. Ramón Javier Peláez de Fuentes

Científico Titular (desde 22 de noviembre) /

Tenured Scientist (since November 22nd)

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vicente Timón Salinero

Científico Titular / *Tenured Scientist*

D. Carlos Álvarez Nicolás

Contratado Predoctoral FPI / *PhD Fellowship*

D. Denís Paredes Roibás

Otros (Estudiante de Doctorado) / *Others (PhD Student)*

D^a Islem Ben Bouikha

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

Dr. Malek Boukallaba

Estancia Temporal / *Authorized Stay*

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:

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Investigadora Científica / (desde 25 de octubre) /
Research Scientist (since October 25th)
Científico Titular (hasta 24 de octubre) /
Tenured Scientist (until October 24th)

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A Ezquerra

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Victor Luis Cruz Cañas

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Profesor de Investigación / Research Professor
Profesor de Investigación / *Research Professor*
Investigadora Científica / *Research Scientist*
Científica Titular / *Tenured Scientist*
Científico Titular / *Tenured Scientist*
Científica Titular / *Tenured Scientist*
Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Alejandro Sanz Parras

Contratado Personal Técnico Apoyo (hasta 30 de sep.) /
PTA Contract (until September 30th)

D. Andrés Cardil Tornos

Titulado Superior Contratado C/P (desde 1 de noviembre) /
University Graduate (since November 1st)

D. José Sena Fernández

Contratado Predoctoral FPI (desde 1 de septiembre) /
PhD Fellowship (since September 1th)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

D^a Clara García Sacristán

Contrato GARJUR - CM (desde 1 de mayo hasta 9 de sept.)/

Contract GARJUR (since May 1st until Sept. 9th)

D^a. Patricia Martínez García

Contrato GARJUR - CM (desde 1 de octubre) /

Contract GARJUR - CM (since October 1st)

Dra. Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Titulado Superior Especializado OPIS / *Specialized University Graduate*

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA FINANCES AND ADMINISTRATION

Dª. Mª Isabel Llerena de Frutos	C. Técnico Especializado de OPI / <i>Specialist Technician OPIs</i>
Dª. Rosario Carrasco Nicolás	C. Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Admvo. Admón. del Estado / <i>General Administration</i>
Dª. Alicia Fernández Clavero	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Ana María García Arribas	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Carmen García Collado	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
Dª. Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admón. del Estado / <i>General Administration</i>
Dª. Concepción Nieto Serrano	C.Téc. Auxiliares Informática Admón. del Estado (jubilación 12 de junio) / <i>IT Technical Auxiliaries (retired on June 12th)</i>
Dª María Salinas Fernández	CFMAC- C. Gral. Admvo. Admón. del Estado (desde 11 de marzo) / <i>General Administration (since March 11th)</i>

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

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

CONSERJERÍA / RECEPTION

Dª Mª Ángeles Castro de la Puente	Ayudante Gestión y Servicios Comunes (desde 1 de diciembre) / <i>Common Services Assistant (since December 1st)</i>
Dª Mª Fuensanta Hernández Tomey	Oficial Gestión y Servicios Comunes (del 18 mayo al 17 noviembre) / <i>Common Services Officer (since May 18th until November 17th)</i>
Dª. Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</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 Téc. y Prof. / <i>Technical and Prof. Activities Officer</i>

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:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos.
- Gravedad cuántica no-local.
- Ondas gravitacionales.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Espectroscopía 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.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física teórica y matemática.
- Relatividad General.
- Teoría de campos perturbativa y grupo de renormalización.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hiperesféricos.
- Métodos ab initio altamente correlacionados y nuevas herramientas computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

Cosmología Cuántica de Lazos

Durante 2021, el Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado con su investigación de las aplicaciones de la Gravedad Cuántica de Lazos a la cosmología y la física de los agujeros negros. La Gravedad Cuántica de Lazos es un programa de cuantización de la Relatividad General no perturbativo e independiente del fondo. Su formalismo subyacente se ha aplicado con éxito al estudio de espacio-tiempos cosmológicos, abriendo una nueva área de investigación conocida como Cosmología Cuántica de Lazos. El grupo es reconocido internacionalmente por desarrollar un formalismo de la Cosmología Cuántica de Lazos en presencia de inhomogeneidades denominado formalismo híbrido. Esta propuesta combina la descripción de un número finito de grados de libertad, que típicamente corresponden a un fondo homogéneo, utilizando la Cosmología Cuántica de Lazos, junto con una cuantización de Fock del contenido de campos del modelo. Un ingrediente importante es un criterio físico para seleccionar un vacío único para esta cuantización de Fock. Hemos propuesto una diagonalización de la contribución de campos a la ligadura hamiltoniana en el régimen asintótico ultravioleta como un criterio físicamente bien motivado para esa elección de vacío. Durante este último año hemos revisado y comprendido tanto el formalismo híbrido como la diagonalización hamiltoniana asintótica como dos pilares básicos de nuestra contribución a la Cosmología Cuántica de Lazos.

También hemos avanzado en la comprensión de las propiedades físicas del vacío seleccionado por la condición de diagonalización asintótica. Hemos demostrado que, para fondos efectivos fenomenológicamente interesantes en

Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida, este vacío proporciona un espectro de potencia para las perturbaciones cosmológicas que no muestra oscilaciones dependientes de la escala a lo largo del tiempo. También hemos probado que nuestra condición es compatible en Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida con la hipótesis de homogeneidad e isotropía cuántica, propuesta por Ashtekar y Gupt para restringir la elección del estado de vacío. En nuestro estudio, hemos encontrado un paso ambiguo en la construcción propuesta por estos colegas nuestros, y hemos sugerido la mejor manera de solucionarlo. Además, hemos llevado a cabo un estudio analítico de las principales diferencias entre los efectos inflacionarios clásicos de un régimen de *fast-roll* y las improntas de Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida en el espectro de potencia primordial. Las soluciones efectivas de interés en Cosmología Cuántica de Lazos suelen contener un período clásico de dominancia cinética antes de la inflación con *slow-roll*, con consecuencias en el espectro de potencia que hemos diferenciado de los fenómenos que ocurren en las proximidades de un rebote en Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida. Nuestros resultados muestran que, si bien los dos tipos de efectos pueden conducir a una supresión drástica de potencia en el sector infrarrojo del espectro, la escala en la que esto sucede es mucho mayor para Cosmología Cuántica de Lazos que para la cosmología relativista clásica. Las escalas correspondientes están relacionadas con la curvatura del espacio-tiempo en el rebote y en el inicio de la inflación, respectivamente.

Además, para manejar la complejidad de las ecuaciones obtenidas en Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida para las perturbaciones y para la determinación del vacío con nuestro criterio de diagonalización, hemos analizado los efectos de orden dominante que la presencia de un potencial de campo escalar produce sobre las perturbaciones cosmológicas primordiales en épocas dominadas cinéticamente, en las que este potencial puede ser ignorado en una primera aproximación. De esta forma, hemos incorporado dichos efectos del potencial del inflatón en torno a un escenario que puede ser estudiado cuasi-analíticamente, abriendo nuevas vías para estudiar observables cosmológicos en modelos realistas.

Por último, también hemos aplicado las técnicas de la Cosmología Cuántica de Lazos a espacio-tiempos de agujeros negros, revisando una geometría efectiva propuesta recientemente por Ashtekar y sus colaboradores, y examinando posibles formas de derivarla de una formulación hamiltoniana. Este es un paso previo necesario para llegar a un formalismo cuántico satisfactorio para agujeros negros en Cosmología Cuántica de Lazos, así como para el posterior desarrollo de técnicas híbridas para tratar sus perturbaciones, que pueden describir las ondas gravitacionales emitidas en ciertos regímenes.

Gravedad cuántica no-local

El grupo de Gravitación y Cosmología es puntero a nivel internacional en el estudio de la gravedad cuántica no-local con operadores asintóticamente polinomiales, una teoría de campos perturbativa unitaria y renormalizable. El avance principal en 2021 ha sido el análisis pormenorizado del fondo estocástico de ondas gravitacionales procedente del espectro tensorial primitivo de una realización específica de la teoría. Contrariamente a lo esperado en la literatura, hemos encontrado que el modelo no produce un fondo estocástico observable, ya que en el límite de altas frecuencias se reduce al fondo predicho por la inflación de Starobinsky local. El resto del esfuerzo del investigador principal de este enfoque ha sido dedicado a la escritura de un libro monográfico sobre la teoría cuántica no-local, una obra ambiciosa y única en su género que será publicada por la Cambridge University Press.

En paralelo, hemos empezado a desarrollar otro tipo de gravedad covariante no-local, con operadores fraccionarios, que ha sido uno de los objetivos principales de grupo en los últimos diez años y que, hasta ahora, no había sido posible alcanzar debido a la dificultad del problema. Hemos empezado a estudiar las propiedades de unitariedad y renormalizabilidad de esta nueva teoría y seguiremos en 2022 con métodos más sofisticados.

Ondas gravitacionales

El grupo de Gravitación y Cosmología es uno de los grupos externos del Consorcio LISA y cuenta con un miembro pleno y uno asociado. Hemos llevado a cabo tres trabajos importantes, dos artículos blancos para el Grupo de Trabajo de Cosmología y de Física Fundamental y un artículo de investigación sobre parametrizaciones dependientes de la frecuencia de la forma de onda de fuentes de ondas gravitacionales en escenarios de gravedad modificada o cuántica. Actualmente los tres trabajos están en revisión interna en LISA y serán publicados en 2022; los artículos blancos serán publicados en la prestigiosa Living Reviews in Relativity. Además, mediante la participación activa en comités internos, hemos contribuido a la reestructuración y reorganización de LISA hasta el final de la fase A de la misión.

Métodos geométricos y covariantes en gravitación

Fernando Barbero y sus colaboradores de la Universidad Carlos III y Penn State University han continuado con la aplicación de métodos geométricos al estudio de la formulación hamiltoniana de teorías de campos, en particular las relacionadas con la relatividad general. En este sentido, el resultado más importante ha sido la aplicación del método de Gotay-Nester-Hinds para el estudio de la formulación hamiltoniana de la extensión parametrizada unimodular de la acción de Holst. Como subproducto de este trabajo se ha obtenido una formulación muy interesante y concisa para la gravedad

expresada en términos de tétradas que se puede utilizar de forma directa y económica para obtener la formulación real de Ashtekar de la relatividad general. Otro resultado interesante obtenido en esta línea de trabajo es la identificación de un método muy eficiente para el tratamiento de teorías de campos expresables con formas diferenciales. Este procedimiento se basa en el uso de las ecuaciones de campo y pullbacks/proyecciones para obtener la formulación hamiltoniana para este tipo de teorías. Así se evitan muchas de las complicaciones de los métodos más tradicionales.

La idea de apoyarse en las ecuaciones de campo es la esencia de los llamados métodos covariantes, que son muy útiles para estudiar las cargas conservadas y se han utilizado ampliamente para analizar la entropía de los agujeros negros. En este sentido hemos usado el llamado algoritmo CPS (espacio de fase covariante) para estudiar la equivalencia de varias acciones gravitatorias (escritas en términos de variables métricas o tétradas) definidas en variedades con fronteras. En este contexto hemos hecho un uso extensivo del marco relativo (*relative framework*) recientemente introducido por Eduardo Villaseñor y Juan Margalef y los métodos cohomológicos asociados.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Propiedades electrónicas de bicapas y tricapas de grafeno giradas

Hemos continuado con nuestra investigación de las fases con ruptura de simetría en bicapas de grafeno giradas en el así llamado ángulo mágico, concentrándonos en las inestabilidades magnéticas del sector de espín. A tal fin, hemos empleado una aproximación autoconsistente de Hartree-Fock, a través del cálculo de la auto-energía del electrón en espacio real. Esto ha hecho posible discernir entre los efectos de la interacción extendida de Coulomb y los de la interacción de Hubbard, poniendo de manifiesto una interesante competición entre las inestabilidades de carga asociadas a la interacción de larga distancia y las inestabilidades de espín ligadas a la interacción local. Hemos demostrado que, a medio llenado de la primera banda de valencia de la bicapa de grafeno girada, hay de hecho una transición de fase para un apantallamiento suficientemente grande de la interacción extendida de Coulomb, señalando el paso a un régimen con total polarización de espín de la banda de valencia. Cuando el nivel de Fermi está en el punto de neutralidad de carga, hemos demostrado que aparece en cambio una fase dominante antiferromagnética con los espines alternando a nivel atómico, es decir, entre las dos subredes de cada lámina de carbono. Esto da lugar a la apertura de una brecha de energía en el espectro electrónico, que debe corresponder con el comportamiento aislante observado experimentalmente en el punto de neutralidad de carga de las bicapas giradas.

Además, hemos investigado el origen de la superconductividad no convencional descubierta recientemente en tricapas de grafeno giradas en el ángulo mágico. Este fenómeno ha mostrado aspectos poco usuales, como es la reapertura de la superconductividad bajo campos magnéticos relativamente fuertes, lo que apunta a un posible mecanismo electrónico de la formación de pares de Cooper. En esta línea, hemos hecho una búsqueda de las fases con ruptura de simetría en el sistema electrónico, que pueden aparecer como consecuencia de la fuerte intensidad efectiva de la interacción de Coulomb en el ángulo mágico. Hemos visto que en general hay una tendencia muy marcada hacia la ruptura de la simetría entre los dos valles de grafeno, acompañada de una reducción de la simetría de las bandas, del grupo C_6 al grupo C_3 . Hemos demostrado que este aumento de la anisotropía en las bandas de valencia de baja energía tiene un profundo efecto en el vértice BCS, que desarrolla fuertes modulaciones en canales donde el acople efectivo de la interacción electrón-electrón llega a ser negativo. Este es el punto de partida requerido para la formación de pares de Cooper, que resulta ser dominante para los armónicos correspondientes a la simetría en onda p , en niveles de dopado adecuados en la banda de valencia de más baja energía. Este mecanismo abre una vía plausible para explicar las principales observaciones experimentales en las tricapas de grafeno giradas y, con una perspectiva más amplia, establece además un nexo universal entre la ruptura de simetría de valle y la superconductividad en onda p que puede manifestarse en otros sistemas con un grado de libertad de valle.

Sistemas cuánticos disipativos de muchos cuerpos

Continuamos con el estudio de sistemas cuánticos disipativos de muchos cuerpos. 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 hermítico que actúa sobre el espacio de matrices densidad. Presentamos la solución exacta de la ecuación de Lindblad para un problema de espines no-hermítico basado en los modelos integrables de Richardson-Gaudin con simetría general SU(N). Este modelo describe la disipación en un sistema de átomos con múltiples niveles acoplados entre sí.

Utilizando esta solución exacta estudiamos la transición al caos en términos de un Liouvilliano de dos parámetros. Uno de los parámetros rompe la integrabilidad y el otro permite la transición entre diferentes límites integrables. La transición se caracteriza por la estadísticapectral de los autovalores complejos de los operadores Liouvillianos usando dos medidas diferentes: la distribución de espaciamientos a primeros vecinos y la proporción entre distancias a primeros y segundos vecinos. El primer estadístico tiene la ventaja de que pudimos derivar una distribución fenomenológica para casos intermedios entre integrabilidad y caos en función de un parámetro que se puede ajustar a los resultados numéricos y que nos mide el grado de caos en el sistema. Sin embargo, para hacer una estimación apropiada de ese parámetro primero debemos realizar un reescalado apropiado de los autovalores en el plano complejo, una operación mucho más delicada y

complicada que en el caso hermítico. En el caso de las proporciones, la ventaja principal es que este procedimiento de reescalado no es necesario, aunque su uso en sistemas intermedios entre regularidad y caos todavía no había sido calibrado. Con nuestro trabajo confirmamos que los resultados de ambas medidas eran consistentes y que el estadístico de las proporciones entre espaciamientos a primeros y segundos vecinos era también apropiado para estudiar la transición al caos en sistemas no hermíticos.

FISICA NUCLEAR TEÓRICA

Dispersión de electrones por núcleos. Factores de forma magnéticos

Se ha estudiado la sensibilidad de los factores de forma magnéticos frente a cambios estructurales en el núcleo, con especial atención a los fenómenos relacionados con la evolución de las formas nucleares y sus posibles transiciones dentro de cadenas isotópicas e isotónicas. Estos factores de forma pueden medirse en experimentos de dispersión elástica de electrones a 180° por núcleos impares. Los cálculos de factores de forma fueron realizados en la aproximación de Born de ondas planas con estructura nuclear descrita por cálculos autoconsistentes deformados de HF+BCS con fuerzas de Skyrme. Se incluyen efectos colectivos y correlaciones nucleón-nucleón.

En primer lugar, se realizó una búsqueda de cadenas de isótopos con Z par y N impar, así como en cadenas de isótones con N par y Z impar en las que se observen cambios en el espín y paridad (J^π) del estado fundamental que sería un signo evidente de cambio estructural. Se consideraron primero cadenas de isótopos impares de vanadio y aluminio como ejemplos de cadenas de núcleos esféricos o deformados en las que no se produce ningún cambio en el J^π del estado fundamental. Esta es la situación esperable cuando no hay cambios estructurales de relevancia y se constata que en ellos los factores de forma magnéticos son muy similares a lo largo de la cadena. Posteriormente, se estudiaron cadenas de isótopos de flúor, manganeso, yodo y cesio, así como cadenas de isótones con N=9, N=11, N=25 y N=57, en las que J^π va cambiando a lo largo de la cadena. Los cálculos correspondientes de estructura nuclear muestran que esos cambios tienen su origen en una transición de forma producida al cambiar el número de nucleones. Los factores de forma calculados para ellos manifiestan unos patrones bien diferenciados que se proponen como indicios de la existencia de una transición de forma. La comparación de los factores de forma calculados con los experimentales medidos en núcleos estables demuestra la calidad del formalismo y la validez de las predicciones.

Desintegración beta en núcleos pesados y superpesados

Se ha estudiado teóricamente la distribución de Gamow-Teller correspondiente a la desintegración de ^{186}Hg en ^{186}Au , que ha sido determinada experimentalmente mediante técnicas de espectroscopía de absorción gamma total. Se ha utilizado un formalismo de pnQRPA deformado basado en campo medio autoconsistente con fuerzas de Skyrme. La interpretación teórica de estos resultados es un problema complejo dado que tanto el núcleo progenitor como el hijo se hallan inmersos en regiones transicionales en las que las formas nucleares cambian rápidamente entre vecinos y que pueden estar mezcladas en cada isótopo concreto. De hecho, la interpretación simple de los datos mediante el uso de formas nucleares puras sin mezcla no es capaz de reproducir las tendencias observadas en las radios de carga de los núcleos en esta región de masa. Se hace por tanto necesario recurrir a un formalismo extendido en el que se mezclan configuraciones obladas y proladas de forma independiente en ^{186}Hg y ^{186}Au . La mejor descripción para el patrón de desintegración y la vida media se obtiene con mezcla de configuraciones con una componente dominante de tipo prolado. Estos resultados corroboran la existencia de una región transicional alrededor de estos núcleos y que la desintegración beta está determinada por el solape entre las funciones de onda.

También se han estudiado las desintegraciones débiles en núcleos superpesados con Z=118, 119, 120 mediante un formalismo similar basado en pnQRPA. El interés de estos núcleos radica en que serán los próximos en ser producidos en el laboratorio y existe una gran actividad teórica y experimental en torno a ellos. La incertidumbre en las energías de la desintegración (Q), originadas por el desconocimiento de sus masas, se traslada en una incertidumbre teórica en las vidas medias que ha sido estudiada considerando diferentes fórmulas de masa. Las vidas medias para desintegración beta y captura electrónica calculadas con métodos microscópicos se comparan con las de desintegración alfa obtenidas mediante fórmulas fenomenológicas. Se encuentra que la desintegración alfa es siempre dominante para estos isótopos y que, por tanto, la producción de núcleos por desintegración débil puede ser despreciada. El estudio fue extendido a distintas cadenas de desintegración alfa originadas en esos isótopos. El cociente entre las vidas medias muestra que alfa generalmente domina por varios órdenes de magnitud. Sin embargo, las vidas medias resultan ser comparables al final de las cadenas, identificando los casos más probables en los que puedan aparecer nuevas ramas de desintegración que conduzcan hacia nuevos isótopos más ricos en neutrones.

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}O (^{24}O más dos neutrones), siendo capaces de reproducir tanto los datos experimentales existentes como los resultados obtenidos con otros modelos fenomenológicos con más parámetros. Se obtiene también que la desintegración del estado fundamental se corresponde con una desintegración directa en el continuo, sin contribución de desintegración secuencial a través de la resonancia $d_{3/2}$ del ^{25}O , resonancia que se obtiene también del cálculo numérico, y cuya energía reproduce la información experimental correspondiente. Igualmente hemos estudiado los procesos de captura radiativa de dos protones a través del ^{68}Se , analizando el carácter directo o secuencial de dicha captura. Igualmente, se ha empleado el núcleo ^{70}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 de 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 CONTAMINATES ATMOSFÉRICOS

Durante 2021, se ha reiniciado 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 (Fig.1).

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_2NH_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 interaccionar con niveles torsionales excitados. Por otra parte, la densidad de los niveles de torsión afecta a los espectros milimétrico, submilimétrico o infrarrojo lejano.



Figura 1

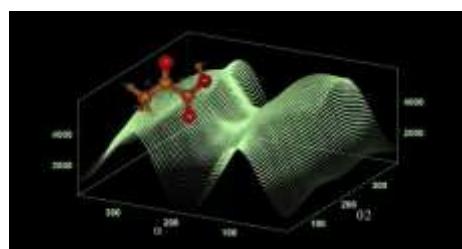


Figura 2

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 2021, el código original ENEDIM se ha modificado para poder tratar sistemas con tres o más movimientos de gran amplitud que interactúan. Un gran esfuerzo se ha dedicado a la espectroscopía 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 CH₃CO y CH₃COCH₂ que se han caracterizado espectroscópicamente. Además, se ha realizado un trabajo muy extenso sobre los isómeros C₃O₃H₆ y del ácido pirúvico. 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, PID2020-112887GB-I00 y COOPB20364.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Estudio de hiper-materia exótica.
- Métodos de seguimiento de partículas y vértices para experimentos de física nuclear de alta energía.
- Investigación sobre machine learning and deep learning a la espectroscopía nuclear experimental.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.
- Espectroscopía intensificada por superficies (SERS, SEF and SEIRA) de sistemas moleculares.
- Nanofabricación.
- Nanosensores.
- Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de materiales de interés en el Patrimonio Cultural.
- Diseño de ecomateriales.
- Análisis toxicológico mediante técnicas espectroscópicas.

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.
- Espectroscopia en vuelo de hipernúcleos ligeros e hipernúcleos exóticos.
- Espectroscopía de núcleos unidos al mesón.
- I + D en seguimiento y reconstrucción de partículas en física nuclear de altas energías.
- I+D en detectores de micro-vértice.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
- Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Metamateriales metálicos transparentes.
- Plasmónica topológica. Nanofabricación y funcionalización de nanoestructuras plasmónicas.
- Caracterización de biomoléculas adsorbidas en nanoestructuras mediante espectroscopías asistidas por plasmones.
- Detección de contaminantes mediante SERS.
- Análisis de colorantes y pigmentos mediante espectroscopía vibracional convencional y espectroscopías vibracionales intensificadas por superficie.
- Cálculos computacionales de espectros vibracionales.
- Estudios in situ de caracterización de materiales.
- Cementos sostenibles.
- Patrimonio subacuático.
- Análisis de huesos basada en la aplicación de técnicas espectroscópicas, Micro-Raman y Micro-FTIR.

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.
- Espectroscopía Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos computacionales.
- Espectroscopía de hipernúcleos en colisiones de iones.
- Algoritmos de reconstrucción de trayectorias y vértices.
- Arquitecturas de deep learning de Pytorch para trayectoria de partículas.
- Cálculos desde primeros principios.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopía Raman Dispersiva.
- Espectroscopía Raman por Transformada de Fourier (FT-Raman).
- Espectroscopía Raman portátil.
- Espectroscopía IR por transformada de Fourier (FTIR).
- Reflectancia total atenuada de infrarrojo (ATR).
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Fluorescencia de Rayos X (XRF).
- Difracción de Rayos X (DRX).

LABOR INVESTIGADORA:

PHASE-0 program R3B@GSI-FAIR: O. Tengblad, A. Perea (AEI PID2019-104390GB-I00)

Debido a la situación de covid-19, no fue posible viajar a GSI, todos los preparativos para el experimento tuvieron que realizarse utilizando personal del grupo local de GSI con algunas excepciones limitadas. Se organizó un sistema para maximizar el soporte en línea a través de ZOOM y el acceso directo desde el exterior a las computadoras y la electrónica. Además, el soporte de turnos de medida y el control y análisis en línea de los flujos de datos entrantes se realizaron de forma remota. Se realizaron tres experimentos en períodos de 1-2 semanas en marzo, mayo y julio-agosto respectivamente, lo que dio tiempo para algunos cambios menores de las configuraciones utilizadas en cada experimento específico. A. Perea diseñó el soporte para el blanco sólido, y la mecánica se construyó en Madrid y se envió a GSI para ser montada con éxito bajo nuestra supervisión de forma remota a través de una conexión de video.

S455 Fisión investigada con haces relativistas-radiactivos, (J. Benlliure / D. Muecher / J. Taeib)

El experimento se preparó a tiempo; especialmente los sistemas detectores para tracking, SOFIA (fragmentos de fisión) y CALIFA (calorímetro-gamma) funcionaron bien. Sin embargo, durante el tiempo de haz, las correlaciones entre los detectores no se pudieron observar en los datos en línea, había extrañas señales adicionales (*triggers*) de CALIFA en el flujo de datos. Se formó un grupo de trabajo especial que logró resolver este problema del *trigger* con éxito en los meses posteriores al experimento. El análisis de datos está en curso. **S515 Funciones de densidad de energía restrictiva** (T. Aumann). El experimento salió bien, TeraBites de datos valiosos guardados en cinta. El análisis será complicado, pero contendrá mucha física. Nuestra responsabilidad, el detector CALIFA, tuvo un papel importante dando valor añadido a los datos obtenidos. El análisis está en curso. **S494 Disociación de Coulomb de ^{16}O en ^{12}C y ^4He** (K. Goebel). Este fue el experimento de mayor duración, primero con cuatro días de haz de prueba para calibrar la configuración en junio, seguido de dos semanas de toma de datos en julio-agosto. El experimento es de especial interés para el grupo IEM, ya que complementa el estudio de reacción directa de $^{19}\text{F}(\text{p},\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ que también estudiamos en nuestro acelerador local en CMAM. Los modelos estelares muestran una sensibilidad excepcional a la reacción $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$. Sin embargo, la energía más baja del centro de masa a la que se ha estudiado esta reacción es 1 MeV, que es aproximadamente 700 keV por encima de la región relevante para la astrofísica. La relación $^{12}\text{C}/^{16}\text{O}$ en estrellas masivas después de la quema de helio tiene una gran influencia en la evolución sucesiva. El único camino desde ^4He a elementos más pesados durante la quema de helio es el llamado proceso triple alfa, donde tres núcleos ^4He se fusionan en un núcleo de carbono: $3\alpha \rightarrow ^{12}\text{C}$. Esta reacción es muy poco probable y, por lo tanto, solo puede ocurrir a través de un proceso en dos pasos que puebla el núcleo ^8Be de muy corta duración ($T_{1/2} = 7 \cdot 10^{-17}$ s): $\alpha + \alpha \rightarrow ^8\text{Be}$ seguido de $\alpha + ^8\text{Be} \rightarrow ^{12}\text{C}$. Aunque la cadena de reacción de fusión es tan rara, hay tiempo suficiente para que el carbono recién producido reaccione de nuevo con los núcleos de helio: $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$. Esta reacción es, por lo tanto, la clave para la comprensión de la relación carbono-oxígeno en el Universo después de la fase de quema de helio.

DEFACTO Detector for Fallout and Air Concentration moniToring: O. Tengblad, (financiado por STUK)

Las redes de alerta temprana son una parte crucial de la preparación para los accidentes nucleares. Una amplia red de alerta temprana permite la detección oportuna de niveles anormales de radiactividad en la atmósfera. Esto es esencial para determinar las medidas de protección adecuadas necesarias para minimizar los posibles efectos graves en la salud causados por la radiación. Se pueden liberar cantidades significativas de materiales radiactivos en varios tipos de accidentes. Esto incluye accidentes nucleares graves como Chernobyl y Fukushima. Además de los accidentes nucleares, las explosiones de armas nucleares en el aire también liberarían grandes cantidades de nucleidos radiactivos a la atmósfera. Los incendios en entornos industriales o médicos que utilizan fuentes radiactivas intensas o explosiones terroristas de las llamadas bombas sucias también podrían liberar cantidades significativas de nucleídos radiactivos.

El objetivo de este proyecto ha sido desarrollar un novedoso sistema de medición de alerta temprana capaz de proporcionar toda la información necesaria para garantizar la seguridad pública en caso de emergencia nuclear.

En un consorcio con la Autoridad Finlandesa de Radiación y Seguridad Nuclear (STUK), el Instituto de Física de Helsinki y el IEM-CSIC hemos producido un prototipo completo de instrumento, que incluye hardware y software, para la detección de la lluvia radiactiva *in situ* continua y el monitoreo de la concentración en el aire. Basado en parte en el detector de Phoswich IEM-CEPA descrito en Memorias del Instituto anteriores, este nuevo instrumento fue desarrollado en 2019-20 y ha sido probado en detalle en medidas de laboratorio y también en el campo en Finlandia durante 2021, donde ha estado expuesto a diferentes situaciones ambientales como lluvia, nieve y variaciones de temperatura de -25 a + 35 grados centígrados. Sin embargo, la prueba de campo final planeada para realizarse en el sitio de Chernóbil, debido a la situación de covid-19, se canceló. El proyecto ha llegado a su conclusión y se aceptó el informe final en STUK, actualmente estamos redactando su publicación en acceso abierto, y negociando con las empresas para hacerse cargo del desarrollo y producir la versión comercial del equipo.

ERNCIP Amenazas Radiológicas y Nucleares a Infraestructuras Críticas (RN): O. Tengblad, (European Commission). En colaboración con colegas de STUK Helsinki FI), la CE-JRC Ispra (IT), la Oficina Federal de Protección Radiológica - BfS (DE) y la Universidad de Ulo (Fi) durante 2020 y 2021 se ha preparado un informe para la Comisión Europea sobre el uso de robots en escenas de crimen radiológico.

La Unión Europea se ha enfrentado en la última década a una serie de amenazas terroristas y ataques de carácter violento. Los grupos radicalizados han llevado a cabo ataques en la UE con el objetivo de maximizar tanto el número de víctimas como el impacto psicológico y económico en la sociedad. En este contexto, el potencial de los materiales CBRNE es aterrador. Los agentes radiológicos y nucleares no sólo son un peligro para la salud, sino que pueden implicar mayores amenazas y tener consecuencias sociales y/o causar daños a gran escala a la economía y el medio ambiente. El objetivo del informe era abordar el tema de una "escena de crimen radiológico" dentro del documento general "*Requisitos y capacidades necesarias para probar equipos robóticos autónomos que transportan dispositivos de medición para la detección de amenazas CBRNE en un entorno hostil / de la vida real*".

Una escena del crimen es cualquier lugar conectado a una investigación policial donde la policía necesita obtener evidencia relevante que podría usarse en un tribunal de justicia. Una escena de crimen radiológico es una escena del crimen en la que se ha producido o se sospecha de un acto delictivo o acto intencional no autorizado que involucra material nuclear u otro material radiactivo. Los primeros en responder a cualquier emergencia y/o amenaza terrorista deben estar al tanto del material eventual de RN en el sitio. Se necesita el apoyo experto de expertos en protección radiológica y evaluadores radiológicos. Primero viene la seguridad de las fuerzas desplegadas en un enfoque de todos los peligros. Además, en el caso de una escena del crimen, la calidad de las pruebas, incluidas las consideraciones sobre la cadena de custodia y la prevención de la contaminación cruzada, son de suma importancia.

Para abordar el problema, el documento primero define qué es una escena de crimen radiológico, y continúa estableciendo un escenario básico para evaluar las necesidades de los investigadores de la escena del crimen para el apoyo de robots. El informe discute específicamente con qué puede ayudar un robot en la escena del crimen, cuáles son los requisitos del robot, cuáles son las limitaciones al usar un robot. Se discute la necesidad de capacitación y pruebas con las técnicas novedosas y también, se menciona el uso de inteligencia artificial y realidad virtual en relación con el uso de robots. Se discutió la necesidad de estandarizar la gestión de la escena del crimen y el uso de equipos novedosos y, finalmente, los aspectos legales al usar estas técnicas en la escena del crimen. El informe se encuentra actualmente en la oficina de publicación de la CE.

EXPERIMENTO P01047 y P01066: EXPERIMENTOS PARA EL ESTUDIO DE REACCIONES NUCLEARES DE INTERÉS ASTROFÍSICO: AGRUPACIÓN α EN NÚCLEOS LIGEROS. CMAM, MADRID. (V.G. Távora, O. Tengblad, J.A. Briz, M.J.G. Borge, A. Perea) (AEI PID2019-104390GB-I00)

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 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}O . Nuestro grupo ha decidido utilizar la reacción nuclear inversa $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha)^{16}\text{O}$ para poblar y determinar las anchuras de los estados no ligados emisores de α de ^{16}O .

Ya que el sistema de adquisición empleado en el experimento realizado en Noviembre en el Centro de Micro-Análisis de Materiales (CMAM) para estudiar la reacción $^{19}\text{F}(\text{p}, \alpha)^{16}\text{O}$ fue una nueva adquisición del grupo, se desarrolló un nuevo software de conversión de datos para el análisis de los mismos. Estos datos se encuentran aún en fase de análisis, sin embargo, se ha llegado a realizar una identificación preliminar de los niveles de origen las partículas α emitidas en la reacción, así como un estudio de los eventos en coincidencia entre los diferentes detectores del montaje experimental. Se continuará profundizando en el análisis de estos datos.

En febrero se realizó un experimento utilizando el mismo montaje experimental para estudiar la reacción $^7\text{Li}(^3\text{He}, \text{p})^9\text{Be}$, ya que una de las formas de estimar la sección eficaz de la reacción $^7\text{Li}(^3\text{H}, \text{n})^9\text{Be}$ es inferirla a partir de los datos de reacciones similares. Además, se trata de un experimento complementario al experimento IS659 de ISOLDE (CERN) sobre la desintegración beta de ^9Li que tomará datos en 2022. El montaje experimental consta de 14 detectores de silicio pixelados en 2x2 que cubren ángulos hacia delante de 27° a 87° , tres detectores de silicio multi-segmentados en 16x16 que cubren desde 82° a 171° hacia atrás y tras estos 3 detectores PAD de silicio, que configura un sistema de telescopios que permite realizar la identificación de partículas emitidas en los dos canales posibles de reacción: $^7\text{Li} (^3\text{He}, \text{p}) ^9\text{Be}$ y $^7\text{Li} (^3\text{He}, \text{d}) ^8\text{Be} \rightarrow 2\alpha$.

Este experimento se encuentra en fase de análisis, aunque se ha obtenido la identificación de partículas (Fig. 1) y el esquema de niveles de los núcleos involucrados en la reacción. El siguiente paso consiste en identificar el nivel energético de origen de las diferentes partículas a partir de la cinemática de la reacción.

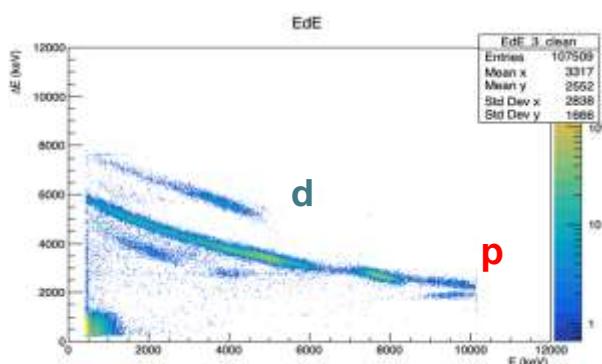


Figura 1. Representación de las “bananas” de identificación de partículas gracias a los telescopios dispuestos en este montaje experimental. Se pueden ver los deuterones y protones emitidos en los dos canales de reacción indicados

DISPERSIÓN ELÁSTICA A ENERGÍAS EN TORNO A LA BARRERA DE COULOMB CON BLANCOS DE ^{208}Pb : LOS CASOS DE ^{15}C Y ^{17}Ne . (J. D. Ovejas, M. J. G. Borge, O. Tengblad) (AEI PID2019-104390GB-I00)

El isótopo de neón ^{17}Ne presenta una muy baja energía de ligadura de sus dos últimos protones $S_{2n}=933$ keV, además de una estrecha distribución momentos tras la reacción de ruptura a ^{15}O y un radio rms un 10% más grande que los núcleos isóbaros ^{17}F , ^{17}N . Todas estas propiedades indican una

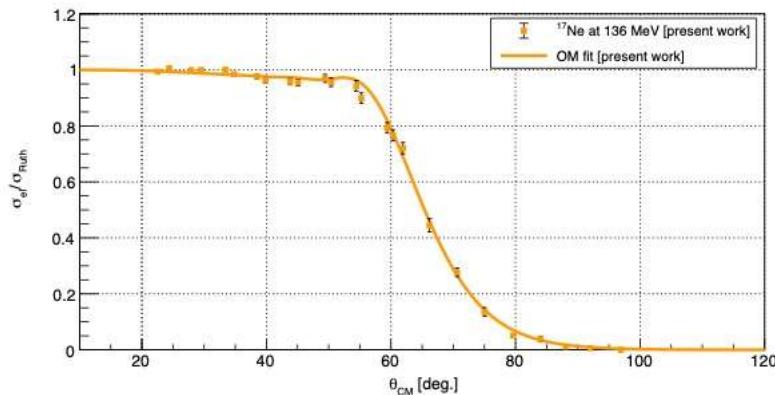


Figura 1. Distribución angular de la sección eficaz elástica normalizada respecto a Rutherford para la reacción $^{17}\text{Ne}+^{208}\text{Pb}$ a 136 MeV junto con el mejor ajuste logrado con un potencial óptico.

estructura de halo de 2 protones donde ninguno de los subsistemas de dos cuerpos sería ligado. La dinámica de reacción de este núcleo fue estudiada a bajas energías, entorno a la barrera de Coulomb, por primera vez en febrero 2020 en SPIRAL1, GANIL (Caen, Francia). La distribución angular de la sección eficaz elástica es determinada con alta granularidad gracias al sistema de detección GLORIA y con una muy buena precisión gracias a la buena intensidad de haz lograda en la instalación, cerca de los $2.2 \cdot 10^4$ pps, sin ningún tipo de contaminante. Este último año se ha realizado la interpretación teórica de este resultado bajo el marco del modelo óptico. Se ha tomado como referencia la dispersión a la misma energía y en el mismo blanco de los isótopos estables $^{20,22}\text{Ne}$, los cuales ya mostraban cierta absorción en ángulos delanteros, aunque, a diferencia del ^{17}Ne , también presentan una interferencia Coulomb-nuclear. Un potencial de superficie imaginario con alta difusividad recrea el patrón de absorción de largo alcance y las distintas profundidades del potencial de volumen ajustan la intensidad del patrón de interferencia. El mejor ajuste logrado para estos datos se representa en la Figura 1 y los parámetros óptimos del potencial en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros del potencial óptico para el mejor ajuste de la sección eficaz diferencial elástica. Difusividades el potencial de volumen $a^v=0.55$ fm y del potencial de superficie $a^s=5.5$ fm. Radios fijados a $r=1.27$ fm

	V [MeV]	W [MeV]	Ws [MeV]	σ_R [mb]	χ^2/N
^{17}Ne	6.7	68.9	0.045	1953	2.4

Estos resultados junto con los ya descritos en memorias anteriores del ^{15}C con un blanco de ^{208}Pb han constituido el tema de tesis de Javier Diaz Ovejas defendida en diciembre del 2021.

LA ESTRUCTURA NUCLEAR DE LOS NÚCLEOS SUPERPESADOS
(FPA2017-84756-C4-2-P, Andrea Jungclaus, J. Luis Egido)

En 2020, presentamos el primer estudio triaxial más allá del campo medio de núcleos superpesados pares (*J.L. Egido y A. Jungclaus, Phys. Rev. Lett. 125, 192504*). Los cálculos para los isótopos pares de Flerovium hacia el supuesto cierre de capas de neutrones $N = 184$ se realizaron utilizando la fuerza de Gogny. En 2021, ampliamos este estudio pasando de las propiedades del estado fundamental a las de los estados excitados y presentamos los espectros de excitación, es decir, las estructuras de banda colectiva, de núcleos superpesados pares-pares obtenidos dentro del mismo enfoque (*J.L. Egido y A. Jungclaus, Phys. Rev. Lett. 126, 192501*). Como ejemplos representativos, hemos elegido los miembros de las cadenas de desintegración α de ^{292}Lv y ^{294}Og , los núcleos pares más pesados que se han sintetizado hasta ahora utilizando reacciones de fusión-evaporación inducidas por un haz de ^{48}Ca . Para los miembros de ambas cadenas de desintegración se predicen características que varían rápidamente, cambios que se acentúan aún más en comparación con las predicciones de modelos colectivos sencillos. Sobre la base de los cálculos actuales, se discute la posibilidad de observar estructuras finas de desintegración α en futuros experimentos.

EXPERIMENTO NP1712-RIBF145R1: PRIMERA ESPECTROSCOPIA DE RAYOS GAMMA DEL NÚCLEO ^{56}Zn DE $T_z = -2$ (FPA2017-84756-C4-2-P, Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

Los estados excitados en ^{56}Zn se poblaron después de la eliminación de un neutrón de un haz de ^{57}Zn que incide en un blanco de Be a energías intermedias en un experimento realizado en el año 2019 en la Fábrica de Haces de Isótopos Radiactivos en RIKEN. Como resultado de un cuidadoso análisis de los datos realizada por nuestro estudiante de doctorado Álvaro Fernández, se observaron tres rayos γ que se asignaron tentativamente para formar la secuencia yrast de ^{56}Zn (A. Fernández, A. Jungclaus *et al.*, *Phys. Lett. B* 823, 136784). Esto convierte a ^{56}Zn en el núcleo $T_z = -2$ más pesado en el que se conocen estados excitados. Las diferencias de las energías de excitación entre estos niveles y los estados análogos isobáricos en el núcleo espejo $T_z = +2$, ^{56}Fe , se compararon con los cálculos a gran escala del modelo de capas considerando el espacio de valencia pf completo y varias contribuciones de ruptura de isospín. Esta comparación, junto con un análisis de las diferencias de energía espejo en los núcleos $A = 58$, $T_z = \pm 2$ ^{58}Zn y ^{58}Ni , proporcionó información única con respecto al tamaño de varios términos de ruptura de isospín en la región por encima de núcleo doblemente mágico ^{56}Ni .

EXPERIMENTO E693@GANIL: REVISIÓN DE LA ESTRUCTURA DEL CLÚSTER ALFA DE ^{212}Po (FPA2017-84756-C4-2-P, Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

Hace unos años, se realizó un estudio espectroscópico de rayos γ de ^{212}Po en el Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), utilizando la reacción de transferencia alfa en cinemática inversa, $^{12}\text{C}(^{208}\text{Pb}, ^{212}\text{Po})^8\text{Be}$, y el espectrómetro gamma AGATA. El objetivo principal de este experimento fue arrojar nueva luz sobre la estructura de cluster α de este núcleo y, en particular, buscar estados excitados adicionales que se predijo que existían mediante cálculos de modelos teóricos. Un cuidadoso análisis basado en las relaciones de coincidencia $\gamma\gamma$, realizado por nuestro estudiante de doctorado Álvaro Fernández, nos permitió establecer 14 nuevos estados excitados en el rango de energía entre 1,9 y 3,3 MeV (A. Fernández, A. Jungclaus *et al.*, *Phys. Rev. C* 104, 054316). Sin embargo, para nuestra sorpresa, ninguno de estos estados puede considerarse como candidato para los niveles predichos por la teoría. Se realizó una comparación sistemática del esquema de excitación establecido experimentalmente de ^{212}Po con cálculos del modelo de capas. Esta comparación sugiere que los seis estados con energías de excitación (espines y paridades) de 1744 (4 $-$), 1751 (8 $-$), 1787 (6 $-$), 1946 (4 $-$), 1986 (8 $-$) y 2016 (6 $-$) keV, que anteriormente se interpretaban como estados de α -cluster, pueden de hecho ser de paridad positiva y pertenecer a multiplets del modelo de capas. Esta importante reinterpretación de la estructura de ^{212}Po está respaldada por la primera información experimental directa con respecto a la polarización lineal de los rayos γ y las secciones transversales de reacción exclusiva.

ESPECTROSCOPIA DE RAYOS GAMMA DE ALTA RESOLUCIÓN DE ^{136}Te DENTRO DEL PROYECTO HiCARI@RIBF-RIKEN (FPA2017-84756-C4-2-P, Jaime Acosta, Andrea Jungclaus)

En 2015, se llevó a cabo un primer experimento de espectroscopía de rayos gamma en vuelo en la Fábrica de Haces de Isótopos Radiactivos en RIKEN (Japón) para estudiar la excitación coulombiana de un haz de ^{136}Te en un blanco de oro a energías relativistas (Portavoces: A. Jungclaus, P. Doornenbal). El objetivo principal de esta medida fue establecer un procedimiento de análisis de datos para este tipo de experimento y determinar en detalle las incertidumbres sistemáticas involucradas en dicho análisis. Además de la línea característica a 607 keV correspondiente a la desintegración del primer estado excitado 2^+ de ^{136}Te , se observó por primera vez un exceso de intensidad a energías de rayos gamma en torno a 4 MeV (tesis doctoral de Víctor Vaquero, UAM, 2018). Este sorprendente resultado sugirió la existencia de un estado excitado altamente colectivo a una energía alrededor de 4 MeV en este núcleo. Desafortunadamente, la baja resolución energética del espectrómetro de rayos gamma utilizado en ese experimento hizo imposible determinar con precisión la energía y el patrón de desintegración de este nuevo e intrigante estado.

En el otoño de 2020, se llevó a cabo un experimento de seguimiento (NP1912-RIBF193) en RIBF, esta vez utilizando un espectrómetro de rayos γ compuesto por detectores de germanio de alta resolución (HiCARI), que permitirá determinar las propiedades del estado a altas energías de excitación en ^{136}Te . Además de la medida de la excitación inelástica en un blanco de oro, también se estudió la misma reacción en un blanco de berilio. Comparando las secciones eficaces de la excitación inelástica en blancos de reacción pesados y ligeros, se puede obtener información sobre el espín del estado. En 2021, se inició el análisis de los datos tomados en este experimento como parte del proyecto de tesis doctoral de Jaime Acosta. Una vez que se determinen las calibraciones de todos los detectores involucrados en el experimento y se obtenga una identificación inequívoca de los componentes de haz, en el siguiente paso se procede al estudio de los espectros de rayos gamma corregidos por el efecto Doppler que se compararán con simulaciones Monte Carlo realistas.

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

La llegada a España de la técnica de tratamiento de protonterapia en 2020 (en los centros Quirónsalud y Clínica Universitaria de Navarra) ha motivado nuevas actividades de investigación como las de este proyecto. Además, hay nuevos centros aprobados y que serán construidos en los próximos años. El objetivo de nuestras actividades es diseñar un prototipo de escáner de protones empleando la técnica de Tomografía Computerizada con protones (proton-CT). El uso de esta

técnica permitiría aumentar la precisión de los planes de tratamiento en protonterapia y un mayor control de la dosis recibida al reducir incertidumbres en el rango de protones con respecto a imágenes con rayos X (xCT) al estar empleando la misma partícula tanto para la dosimetría como para el tratamiento.

El grupo trabajó primero en el laboratorio del IEM mediante simulaciones Monte Carlo con el objetivo de optimizar el sistema experimental antes de desplazarse al centro de protonterapia en donde se realizó la medida. En junio de 2021, el grupo del IEM se desplazó al Cyclotron Centre Bronowice (CCB) en Cracovia (Polonia) para realizar pruebas experimentales con protones en un centro de protonterapia. Allí realizamos radiografías de muestras con patrones espaciales fabricados en aluminio que se colocaron dentro de piezas de Polimetilmetacrilato (PMMA). Además, se realizaron tomografías de objetos fabricados en PMMA con incrustaciones de agua y alcohol y con patrones espaciales para evaluar la resolución espacial alcanzada con nuestro dispositivo. Se utilizaron haces de protones de 100 MeV para realizar las radiografías (2-dim) y 110 MeV para realizar las tomografías (3-dim). Los resultados obtenidos para las radiografías se muestran en la figura de debajo. Los resultados fueron presentados en diversas conferencias internacionales, ANIMMA 2021 y ANPC 2021 y ya han sido parcialmente publicados.

El grupo continúa analizando las reconstrucciones tomográficas con el objetivo optimizar los algoritmos de reconstrucción utilizados y obtener las mejores imágenes posibles para poder evaluar las características y el potencial de nuestro dispositivo. Un nuevo experimento está planificado para ser realizado en 2022, en el centro CCB de Cracovia. En él se investigarán más aspectos relevantes como la determinación de valores de poder de frenado relativo de diversos materiales y la influencia de la dispersión múltiple de Coulomb (MCS) en la reconstrucción constituyendo un paso más hacia la futura implementación o uso del dispositivo en entorno clínico.

Trabajos de Fin de Máster

En el año 2021 se desarrollaron tres trabajos de fin de máster dentro del marco del proyecto “Protón-terapia y técnicas nucleares para Oncología” (PRONTO, por su nombre en inglés), financiado por el gobierno local de Madrid, con referencia B2017/BMD-3888.

1) Pruebas experimentales del prototipo de escáner de imágenes médicas con protones desarrollado en el IEM

Amanda Nathali Nerio Aguirre, Máster Universitario Erasmus Mundus en Física Nuclear.

El prototipo de escáner que fue desarrollado en el IEM-CSIC consta de dos detectores multisegmentados de silicio de 1000 μm , conformando el sistema de rastreo; y el detector CEPA4 como detector de energía residual como se muestra en la Fig. 1(a). Se estudió las características del prototipo de escáner de tomografía computarizada con protones (TCp) en el Centro de Ciclotrones Bronowice (CCB) en Cracovia, Polonia, en junio de 2021. Imágenes de los fantomas de espesor uniforme mostrados en la Fig. 1(b) fueron analizadas utilizando ROOT e ImageJ. Con el uso de este prototipo de escáner TCp, los diferentes materiales de cada fantoma se distinguen claramente. Los resultados mostraron gran parecido a la forma y dimensiones de los fantomas (Fig. 1(c)). Además, en modo radiografía, el prototipo de escáner fue capaz de resolver estructuras con tamaño de hasta 2–3 mm para haces de protones de 100 MeV y 110 MeV, respectivamente.

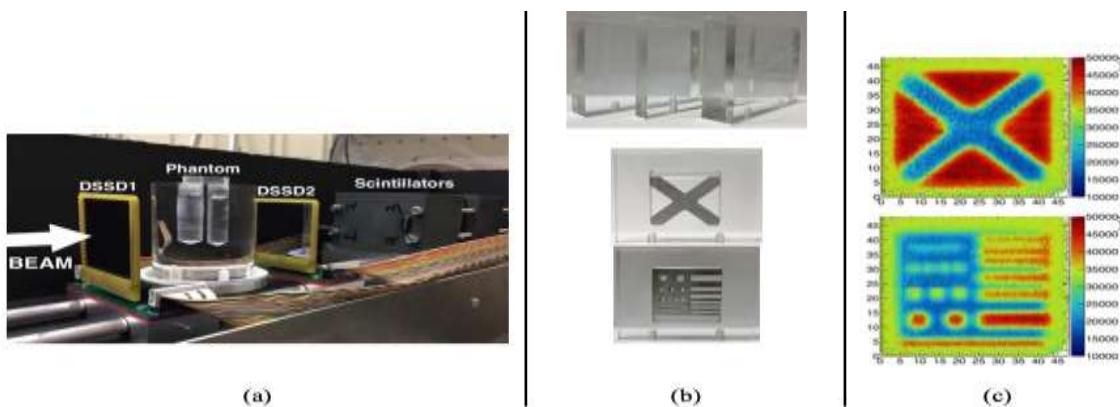
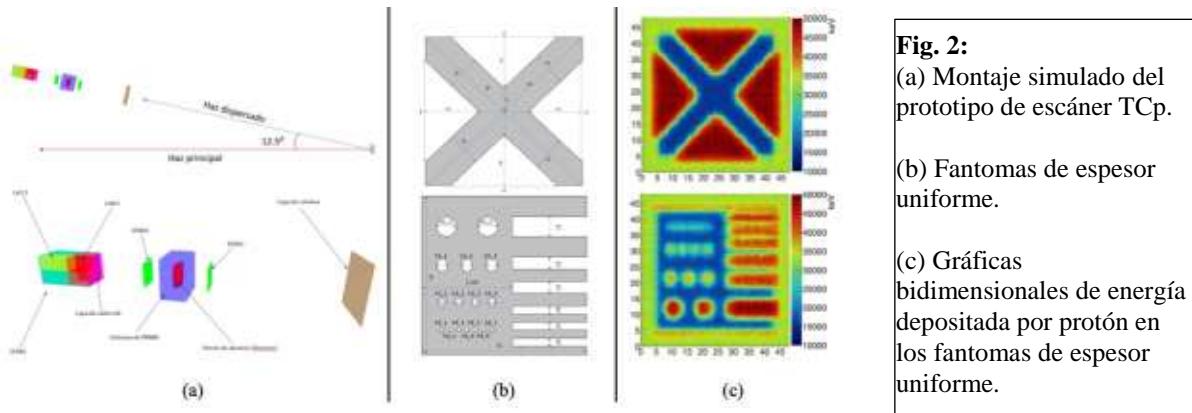


Fig. 1: (a) Montaje experimental del prototipo de escáner de TCp desarrollado en el IEM-CSIC colocado en una línea de haz del CCB en Cracovia (Polonia). (b) Fantomas de espesor uniforme. (c) Gráficas bidimensionales de energía depositada por protón en los fantomas de espesor uniforme.

2) Estudio de capturas radiográficas de fantomas gruesos empleando el prototipo de escáner de protones del IEM Carlos Ballesteros Bejarano, Máster Interuniversitario en Física Nuclear.

Se simuló imágenes de fantomas de espesor uniforme utilizando códigos de Monte Carlo con el conjunto de herramientas de simulación GEANT4. Las Figs. 2(a) y 2(b) muestran una descripción detallada del Sistema experimental que incluyó todos los elementos activos y pasivos de los que consta el prototipo, y la geometría de los fantomas de espesor uniforme que fueron simulados, respectivamente. Se obtuvo imágenes de los fantomas, en donde fue evidente las formas y las transiciones entre los materiales que componen dichos fantomas, como puede verse en la Fig. 2(c). Se obtuvo buena concordancia entre los resultados simulados y experimentales.



3) Reconstrucción de imágenes tomográficas del prototipo de escáner pCT del IEM

Pedro Martínez Moreno, Máster Interuniversitario en Física Nuclear.

En este proyecto, la capacidad de obtener reconstrucciones tomográficas utilizando el prototipo de escáner de TCp del IEM fue estudiada. Se realizaron simulaciones de Monte Carlo utilizando GEANT4. El efecto de la estadística de las proyecciones, la cantidad de proyecciones y el algoritmo de reconstrucción en las imágenes reconstruidas de TCp fue estudiado. Las Figs. 3(a) y 3(b) muestran el sinograma del fantoma cilíndrico con un paso angular de 2° , y la reconstrucción de una rebanada del fantoma por medio del algoritmo SIRT. Los algoritmos de reconstrucción tomográfica convencional han proporcionado buenos resultados empleando radiografías con una fluencia de por lo menos 151 protones por centímetro cuadrado y 18 proyecciones como mínimo. Las reconstrucciones con el algoritmo SIRT proporcionaron las imágenes con mayor contraste y resolución espacial.

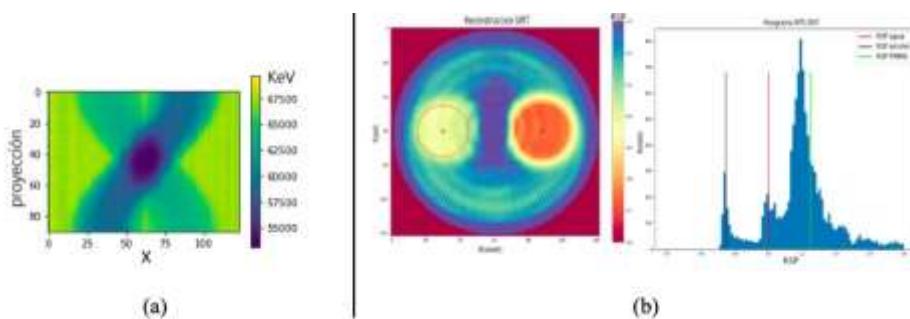


Fig. 3: Resultados simulados para la reconstrucción tomográfica de un fantoma cilíndrico de PMMA, agua y alcohol. (a) Sinograma del fantoma para un paso angular de 2° . (b) Reconstrucción de una rebanada del fantoma, normalizado al valor de RSP del agua (círculo amarillo) e histograma de los valores de RSP, mostrando el valor promedio para las regiones de agua, alcohol y PMMA.

DeepHyp - TÉCNICAS DE DEEP LEARNING PARA EL ESTUDIO DE HIPERNÚCLEOS EXÓTICOS (Project 2019-T1/TIC-13194 TALENTO M1 Comunidad de Madrid, C. Rappold, S. Esrig López)

Dentro de la colaboración WASA@FRS, el próximo experimento S447 de espectroscopía de hipernúcleos 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 delante 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 mejorar la espectroscopía hipernuclear. El objetivo principal es abordar el rompecabezas actual de la vida útil del hipertritón 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 las simulaciones más realistas en Geant4 del aparato experimental. Se estimaron eficiencias de seguimiento de las partículas y la reconstrucción de sucesos. La óptica del haz de S2-S4 fue optimizada para aceptación de los fragmentos 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.

Hyp@FRS - MÉTODOS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO APLICADOS A LA ESPECTROSCOPIA DE HIPERNUCLEOS: EL PUZZLE DE LA VIDA ÚTIL DE HIPERTRITIO Y DE LA EXISTENCIA DE NNLAMBDA ESTUDIADOS EN WASA@FRS (PID2020-118009GA-I00, C. Rappold, S. Esrig López)

El objetivo de Hyp@FRS es estudiar los hipernúcleos ligeros mediante reacciones inducidas por iones utilizando el separador de fragmentos de las instalaciones de GSI y FAIR en Darmstadt, Alemania, como un espectrómetro de alta resolución. El objetivo de Hyp@FRS es mejorar el análisis espectroscópico utilizando las técnicas de "machine learning". El primer paso en este proyecto gira entorno al experimento WASA@FRS de las instalaciones GSI-FAIR. El proyecto aquí propuesto persigue validar o descartar en el próximo experimento los resultados de nuestra primera campaña en 2009 con el experimento HypHI – Phase 0. Se llevará a cabo el desarrollo de métodos novedosos de "machine learning" a estos experimentos de espectroscopía de hipernúcleos. Redes neuronales y arquitecturas con "long short-term memory" se considerarán en primer lugar para el modelado no lineal de la óptica de iones en el espectrómetro magnético y, en segundo lugar, se aplicarán al seguimiento de las partículas medidas en los aparatos experimentales. El experimento WASA@FRS está programado para marzo de 2022. El análisis de datos utilizará los métodos de "machine learning" explicados anteriormente. También el proyecto I+D incorpora la construcción del sistema de lectura del detector de micro vértice de silicio para la estimación del vértice de interacción de las colisiones nucleares. Los objetivos finales de esta propuesta son abordar el actual rompecabezas de la vida útil del hipertritón y la confirmación de la observación del estado ligado a $nn\Lambda$ (un estado de dos neutrones y un hiperón Λ).

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Dentro de nuestras investigaciones sobre la adsorción y confinamiento del hidrógeno molecular a temperaturas criogénicas, en 2021 hemos completado un estudio experimental acerca del confinamiento de deuterio molecular dentro de nanotubos de carbono. Usando un montaje experimental propio desarrollado en los años anteriores, se estudiaron la estructura de deuterium adsorbido en nanotubos de carbono abiertos mediante difracción de neutrones. Mediante el modelado teórico preciso de la señal de neutrones dispersados por el sistema hemos descubierto la formación a bajas temperaturas de unos inesperados cristales unidimensionales (1D) confinados dentro de los nanotubos. Dichos cristales llegan a alcanzar la unidimensionalidad estricta, i.e., todas las moléculas constituyentes de la estructura periódica pueden considerarse pertenecientes a la superficie siendo la estructura no trivial (no es una cadena unidimensional). Lo sorprendente del hallazgo es que el cristal 1D conserva todas simetrías del cristal volúmico compatibles con el confinamiento, es decir, corresponde a una determinada restricción (cilíndrica) de éste. Siendo que las interacciones de las moléculas con las paredes internas del nanotubo son mucho mayores que las interacciones entre éstas, el resultado es completamente inesperado en términos intuitivos (energéticos). El hallazgo pone de manifiesto el comportamiento extraordinariamente cuántico de la molécula, tanto en los grados de libertad traslacionales (una alta deslocalización cuántica del centro de masas) como orientacionales (deslocalización cuántica esencialmente total de la dirección del eje molecular) de tal forma que los cálculos actuales, incapaces de incorporar un tratamiento cuántico completo en todos los grados de libertad, predicen estructuras dictadas por un recubrimiento óptimo de las paredes internas del nanotubo y que no son observadas.

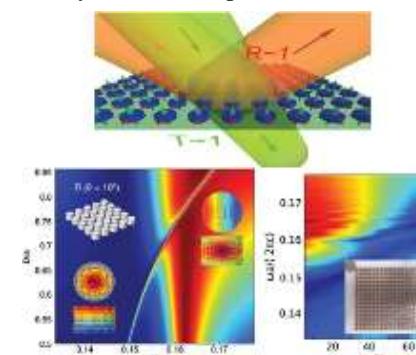
Dentro de la consolidada colaboración con el grupo de la Dra. Leonor Chico (ahora en la Universidad Complutense), hemos extendido el estudio de la sorprendente estructura electrónica de nanotubos de carbono de capa simple en su estado colapsado. Ha quedado claro que dichos sistemas representan un ejemplo particularmente útil de lo que se conoce como super redes de Moire unidimensionales presentando todas las características de su homólogo bidimensional, las celebradas bicapas de grafeno desalineadas (twisted bilayer graphene).

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 metaátomos 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*).
- también en colaboración con el grupo de Jaime Gómez Rivas, la simetría subyacente a la aparición de BIC se revela claramente en los campos electromagnéticos locales, a su vez confirmados experimentalmente para una metasuperficie plana de dímeros de varillas de Au mediante medidas de campo cercano en el dominio THz.
- 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).
- los cuasi-BIC pueden sintonizarse y encenderse/apagarse activamente a través de campos magnéticos en metasuperficies con metaátomos adecuados con actividad magneto-óptica, en colaboración con Antonio García-Martín (IMN-CSIC).



PROPIEDADES ÓPTICAS FUNDAMENTALES DE PARTICULAS DIELECTRICAS

En colaboración con el grupo de Manuel Marqués (UAM), hemos demostrado analíticamente que los modos guiados con densidad de espín transversal inducen torques ópticos en función del carácter, ya sea eléctrico o magnético, de las partículas dipolares. La existencia de un momento de espín longitudinal extraordinario distinto de cero modifica las fuerzas ópticas, ya sea mejorando o inhibiendo la presión de radiación. Finalmente, mostramos que las partículas dipolares quirales también sufren fuerzas laterales inducidas por la densidad de espín transversal, que podrían tener aplicación en clasificación de partículas quirales.

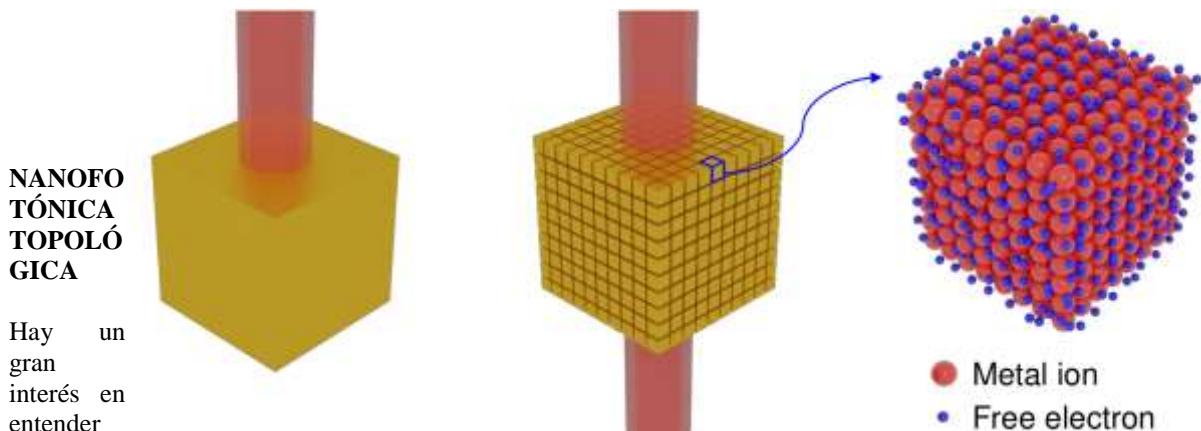
METAMATERIALES METÁLICOS EXTREMADAMENTE TRANSPARENTES

Los metamateriales son extremadamente importantes en las tecnologías avanzadas, pero generalmente dependen del comportamiento resonante de sus bloques constituyentes. Esto limita fuertemente la aplicación de metamateriales a rangos de bandas de frecuencia particulares. Sin embargo, los metamateriales con comportamientos de banda ancha son muy deseables y esenciales para muchas aplicaciones.

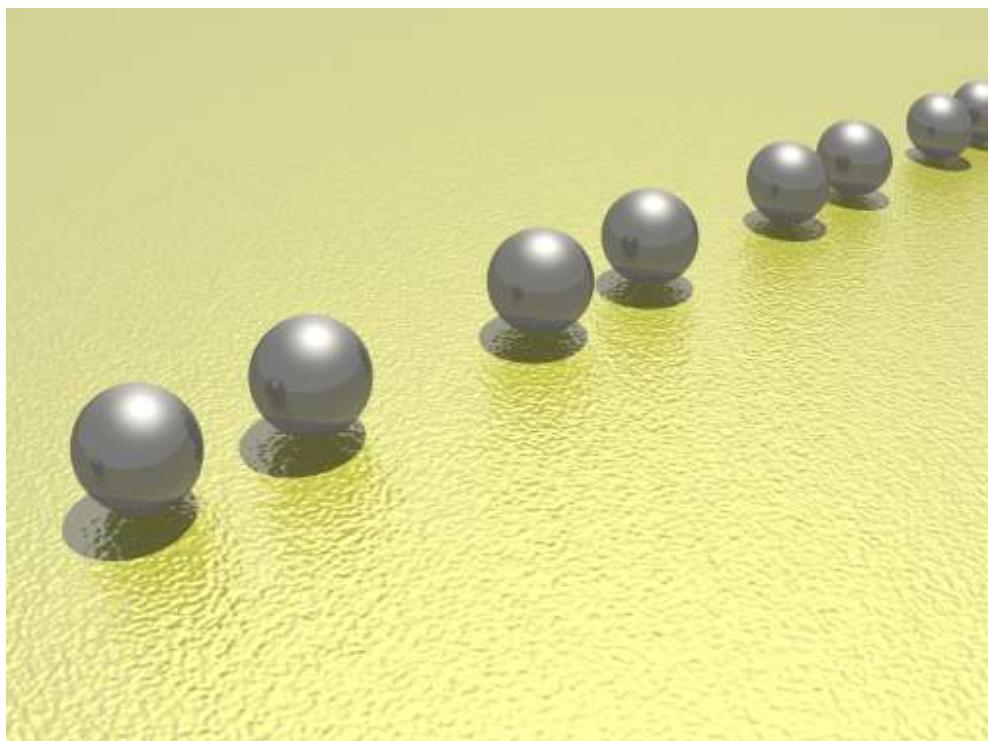
Nosotros exploramos metamateriales descubiertos recientemente que están compuestos de nanopartículas metálicas densamente empaquetadas pero que se comportan como dieléctricos efectivos. Dichos metamateriales son extremadamente transparentes para todas las longitudes de onda dentro o más allá del infrarrojo cercano y su rendimiento es constante en un rango de frecuencias de banda ultra ancha, lo cual es vital para muchos dispositivos que funcionan en el mismo rango de frecuencias. La capacidad de ajustar el índice de refracción de estos metamateriales a valores anormalmente altos mientras se mantiene la transparencia abre nuevas vías, como la creación de metalentes planas y finas en la región de los terahercios, donde actualmente solo se encuentran disponibles lentes voluminosas. Para resaltar esas características, estudiamos varias posibles aplicaciones en la zona del infrarrojo y de los terahercios.

Estos metamateriales forman dieléctricos efectivos que están prácticamente libres de dispersión cromática 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 "dblemente mejorados" que podrían aumentar las mediciones realizadas

utilizando espectroscopía 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.



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 nanoscalas, 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 condensadas. 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.

DISEÑO DE NANOSENSORES

El diseño de sensores con nanoestructuras ha sido uno de los principales objetivos del trabajo experimental de nuestro grupo durante el año 2021. Estos sensores requieren la síntesis de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas. 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. Entre estas nanopartículas se encuentran las nanoestrellas de plata, sistemas éstos que presentan propiedades morfológicas específicas conducentes a altas intensificaciones del campo electromagnético.

Asimismo, el diseño de nanosensores implica una modificación de las propiedades físico-químicas de las nanopartículas mediante la funcionalización de las mismas. Esta funcionalización puede conseguirse mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas sobre las nanoestructuras, lo que permite incrementar 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. En este sentido, se aplicaron diversas estrategias de funcionalización basadas en el uso de: a) calixarenos; b) ciclodextrinas y c) moléculas con estructura cruciforme.

Los calixarenos se caracterizan por poseer una cavidad interna dentro de la cual se pueden alojar moléculas difíciles de detectar por espectroscopía Raman intensificada por nanoestructuras (SERS). Durante 2021 se continuó con el uso de nuevas generaciones de calixarenos caracterizadas por presentar en su estructura diferentes puntos de unión con las superficies metálicas. Estos nuevos ensambladores se probaron en 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) y con la empresa Saftra Photonics. Esta última empresa ha licenciado la patente desarrollada por nuestro grupo en la detección de contaminantes emergentes mediante SERS.

Las ciclodextrinas han sido empleadas en la funcionalización de nanopartículas para la detección de trazas de otro tipo de contaminantes emergentes como son los bisfenoles. Las ciclodextrinas empleadas a tal fin necesitan incorporar en su estructura grupos tioles (-SH) que permiten en anclaje de la macromolécula sobre la superficie del metal. Al igual que los calixarenos, estas moléculas presentan una cavidad interna con características diferentes que permiten la interacción con moléculas de difícil adsorción sobre metales, con la ventaja adicional de su alta biocompatibilidad, ya que están formadas por oligómeros de unidades de glucosa formando ciclos de 6, 7 u 8 unidades.

Finalmente, las moléculas cruciformes, son sustancias sintéticas que presentan dos puntos de unión con los metales y una estructura aromática en la parte intermedia. Este tipo de moléculas actúan ensamblando dos nanopartículas, generando puntos de alta intensificación de campo, o hot spots, por lo que desempeñan la doble función de activar las nanopartículas por ensamblaje de las mismas, y la captación del contaminante que viene a colocarse justamente en la zona de alta intensificación. Esta estrategia permite aumentar considerablemente la sensibilidad y la especificidad de la detección por SERS. La disponibilidad de estos ensambladores cruciformes ha sido posible gracias a la colaboración con investigadores de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, quienes han sintetizado varias de estas moléculas con diferentes estructuras incluyendo en su estructura residuos de piridina y tiofeno, grupos éstos capaces de adherirse fuertemente a la superficie del metal.

EFFECTOS PLASMÓNICOS Y ANÁLISIS DE BIOMOLÉCULAS

La excitación de plasmones en metales nanoestructurados, fundamentalmente plata y oro, pueden ser empleados en el estudio de biomoléculas. Este tipo de análisis permite una caracterización de biomoléculas a concentraciones fisiológicas, lo que permite la caracterización de las mismas a concentraciones parecidas a los medios biológicos en donde éstas se encuentran.

Los efectos plasmónicos analizados han sido los siguientes: a) resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR); b) hibridación interpartícula de plasmones, manifestada a través de procesos de agregación de nanopartículas; y c) la intensificación de campo eléctrico inducida fundamentalmente en los puntos de máxima intensificación de campo localizados en espacios interpartículas o gaps, y en puntas generadas en nanopartículas de morfología anisotrópica. Este último efecto es el responsable de la técnica SERS.

La exploración de estos efectos se ha realizado en diferentes biomoléculas. Durante el 2021 se ha realizado un estudio de la adsorción de péptidos sobre nanopartículas, en particular oligopeptidos empleados en la fabricación de prótesis, y otros de gran trascendencia en medicina como los amiloides beta. Estos últimos amiloides se consideran los responsables de la enfermedad neurodegenerativa de Alzheimer. Los experimentos SERS y otros efectos plasmónicos realizados sobre los péptidos amiloides con diferente secuencia han revelado la estructura que éstos adoptan sobre nanopartículas plasmónicas,

lo que unido a la detección a bajas concentraciones nos ha permitido proponer un método de análisis de estas biomoléculas con importantes implicaciones terapéuticas.

Otra interesante aplicación de los efectos plasmónicos ha sido la detección de biomoléculas en materiales biológicos y arqueológicos sin necesidad de su extracción de los materiales matriz, lo que permite desarrollar un método de análisis *in situ* que preserva los materiales de origen. Esta metodología se ha aplicado en el caso de la detección del pigmento natural ácido carmínico, elemento esencial en el colorante carmín, en textiles arqueológicos provenientes del norte de Chile. En este tipo de materiales se han empleado nanopartículas de plata con forma de estrella, ya que generan una intensificación del campo superior al de las nanoesferas. El análisis pormenorizado del colorante carmínico en fibras textiles de lana ha revelado también la presencia de material biológico procedente de las cochinillas, insectos a partir de los cuales se extrae el colorante rojo carmín. Concretamente se detectaron bases de nitrógeno características de los ácidos nucleicos de estos insectos.

Las nanoestrellas de plata se han empleado también en la detección de ácido carmínico en materiales biológicos como las plumas de aves. Esta investigación se ha llevado a cabo en plumas de *Regulus caléndula*, una especie de pájaro con una cresta de plumas rojas en su cabeza. El empleo de nanopartículas con forma de estrella ha revelado la presencia de ácido carmínico en plumas de su cresta, lo que indica que el colorante se adquiere a través de la dieta de este pájaro a base de insectos cochinilla durante sus períodos migratorios en América del Norte. Esta investigación se ha llevado a cabo gracias a una colaboración con investigadores de la Universidad de California en Los Ángeles (UCLA).

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DE MATERIALES DE INTERÉS EN EL PATRIMONIO CULTURAL.

Dentro de esta línea de investigación, se ha comenzado un estudio comparativo de la detección mediante espectroscopía SERS de colorantes con estructuras similares, pero con diferente carga, positiva y negativa. Para ello se va a llevar a cabo el análisis de colorantes sintéticos azules de la familia de los triazilmetanos. Las nanopartículas de plata empleadas como substratos SERS presentan una cierta carga negativa en su superficie debido a los restos de iones citrato empleados en la fabricación de las nanopartículas. Por este motivo, la adsorción de moléculas con cargas positivas resulta favorecido, a diferencia de las moléculas cargadas negativamente. Así, para el estudio SERS de estos dos tipos de compuestos orgánicos son necesarios distintos protocolos de análisis. En este trabajo, realizado en colaboración con la Universidad de Roma “La Sapienza”, se ha comenzado por el estudio de dos colorantes catiónicos, los triazilmetanos azul victoria R y B. Así, se han probado distintas condiciones experimentales: longitud de onda de excitación, pH y concentración, con objeto de optimizar la estrategia de detección y estudio de los colorantes. Debido al color azul de los compuestos estudiados, la excitación a 532 nm da lugar a espectros SERS más intensos, ya que se producen condiciones de pre-resonancia Raman. Por este motivo, esta longitud de onda se ha empleado para obtener espectros SERS de una fibra de lana teñida con azul victoria B, identificándose fácilmente el colorante.

Se ha continuado en 2021 con la investigación 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, infrarroja 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. Este trabajo se está completando con la fabricación de tintas ferrogálicas en nuestro laboratorio siguiendo las recetas encontradas en manuscritos antiguos, para su posterior comparación con las tintas de manuscritos históricos.

Asimismo, se ha trabajado en la aplicación de técnicas espectroscópicas al estudio y caracterización de diferentes tipos de materiales utilizados en la síntesis, restauración y conservación del Patrimonio Cultural tanto antiguo como moderno. Cabe destacar los estudios realizados con técnicas espectroscópicas sobre pigmentos de los siglos XV y XX, en colaboración con las Universidades de PUCMM y UNPHU de la República Dominicana. En este mismo proyecto se ha empezado un estudio sobre la caracterización de morteros de la época colonial procedentes del segundo asentamiento de Colón. Se mantiene la colaboración con el IETcc sobre la síntesis de ecocementos con aplicación en impresoras 3D utilizando residuos de construcción y demolición (RCD) y a través de diferentes técnicas espectroscópicas. Se ha colaborado con el proyecto europeo Innovaconcrete en el estudio que el efecto de aditivos de nueva generación tiene sobre la hidratación de las fases mayoritarias del cemento en las primeras edades de la hidratación. Finalmente se está estudiando mediante SERS, el efecto de los microplásticos en el deterioro del Patrimonio sumergido.

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.
- 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.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

LABOR INVESTIGADORA:

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Durante 2021 hemos continuado con el estudio cuantitativo de flujos de CO₂ fuera del equilibrio, ampliando el rango de temperaturas hasta 1100 K. La relajación vibracional de CO₂ es un proceso de gran importancia en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte, y los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil en dinámica de fluidos donde es posible estudiar las colisiones intermoleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Para ello en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular disponemos de dos instalaciones de diagnóstico de chorros de gases y líquidos mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinticinco años.

Este año hemos abordado una notable mejora instrumental. Se ha instalado un nuevo láser de fibra, capaz de emitir 10 W cw a 532 nm, lo que conlleva un ahorro considerable en consumo eléctrico y refrigeración respecto del láser de Ar+ empleado hasta ahora. Además, la menor anchura del nuevo haz láser permite registrar espectros Raman con mayor resolución espacial, y más próximos al orificio de salida de las toberas.

Por otra parte, se ha completado el montaje del nuevo diseño de portatoberas de alta temperatura, con nuevos elementos calefactores resistivos, que permiten calentarla hasta 1100 K. Ello ha implicado fabricar nuevas toberas de inconel por electroerosión, ya que las anteriores tenían soldaduras que no aguantaban temperaturas tan altas, y sellar de forma estanca las uniones roscadas, para lo que se tuvieron que probar diversas masillas cerámicas y adhesivos de tipo cemento. Finalmente, hemos tenido que diseñar un nuevo escudo térmico de protección de los microposicionadores y demás

componentes sensibles de la cámara de expansiones, así como un protocolo de calentamiento compatible con la necesaria estabilidad óptica del instrumento.

Con este nuevo montaje hemos continuado con los experimentos de la relajación vibracional y rotacional de CO₂. Se han realizado medidas de densidades y temperaturas rotacionales y vibracionales en chorros supersónicos de CO₂ desde una tobera de 0,25 mm, calentada a temperaturas de 800, 900, 1000 y 1100 K, así como medidas en la onda de choque frontal (disco de Mach) de chorros producidos con tobreras calentadas a 1100 K.

Del análisis de los experimentos anteriores hemos podido medir la rotura de equilibrio termodinámico entre los grados de libertad vibracionales, rotacional y translacional, así como su evolución temporal. Se han determinado por primera vez las tasas de transferencia por colisiones inelásticas rotacionales J→J-2 del CO₂, y se ha obtenido tiempos de relajación rotacional y vibracionales (distintos para cada nivel), y su contribución a la viscosidad de volumen.

Por otra parte, se ha iniciado el estudio de la capacidad calorífica del CO₂ en condiciones de no-equilibrio termodinámico (n-LTE). Se concluye que esta magnitud, en condiciones n-LTE difiere fuertemente de la capacidad calorífica en equilibrio (LTE) y deja, por tanto, de ser una magnitud molecular para convertirse en fuertemente dependiente de las condiciones locales fluidodinámicas del medio. De este modo el coeficiente adiabático $\gamma=C_p/C_v$, ampliamente utilizado en los cálculos fluidodinámicos, pierde su sentido y conduce a errores, tanto numéricos como conceptuales. Como alternativa, se ha desarrollado una formulación que permite relacionar la densidad numérica y la temperatura de una forma mucho más precisa.

Finalmente, se ha diseñado un sistema con la intención de medir mediante espectroscopía Raman el campo de flujo (temperaturas y densidades) en microcapilares de vidrio, y poder caracterizar así la transición del régimen de flujo subsónico al supersónico. A pesar de su interés científico y tecnológico, este tipo de medidas no se han realizado hasta la fecha. Los primeros ensayos han dado resultados prometedores.

FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Hielos astrofísicos

Durante el año 2021 nos hemos centrado en el estudio de hielos de urea y sus mezclas con agua. Urea es una molécula de gran interés químico y biológico y, en particular, se considera una pieza clave en la química prebiótica en nuestro planeta. La hipótesis de su origen exogénico se ha visto reforzada por la reciente detección de esta especie en el medio interestelar (ISM). Se ha detectado en fase gas, pero es posible que su formación haya ocurrido en los mantos de hielo que recubren los granos de polvo en nubes densas del ISM. Por esta razón hemos estudiado los espectros infrarrojos de hielos de urea, generados mediante depósito desde fase vapor a temperaturas entre 10 K y 270 K. Se ha encontrado que se forma una fase amorfa cuando el depósito se realiza a temperaturas por debajo de 200 K. Se han construido modelos teóricos de sólidos de urea amorfa y cristalina que han permitido predecir su espectro infrarrojo y compararlo con los obtenidos experimentalmente. Se han determinado experimentalmente las fuerzas de banda de esta especie en el infrarrojo, tanto para su fase amorfa como cristalina. Se espera que esta información resulte útil para la detección y cuantificación de la cantidad de urea en hielos astrofísicos. Este trabajo ha sido publicado en la revista *Phys. Chem. Chem. Phys.*

Adicionalmente, se ha estudiado la estabilidad de hielos de urea frente al procesado energético causado por rayos cósmicos o fotones ultravioletas. En el laboratorio se ha utilizado una lámpara de Deuterio para simular la radiación UV del medio interestelar, y electrones de 5 KeV (que inducen una cascada de electrones secundarios en los sólidos) para simular el efecto de los rayos cósmicos. Se han determinado secciones eficaces de destrucción que indican que esta especie es más estable que otras especies de interés prebiótico estudiadas en nuestro laboratorio, como la glicina el isocianato de metilo.

Por otro lado, se ha comenzado con el estudio de la energía de desorción de moléculas orgánicas complejas (COMs) presentes en el ISM desde superficies de hielo de agua amorfa. En particular, hemos escogido metilamina y acetaldehído, dos especies que se han detectado abundantemente en nubes densas del ISM en fase gas. Se postula que estas especies se forman en los mantos de hielo de los granos de polvo, pero su presencia en fase gas en regiones muy frías es difícil de explicar. Conocer la energía de desorción de estas especies de superficies de hielos es fundamental para comprender su formación y evolución. Hemos realizado experimentos de desorción térmica programada de capas de COMs de distinto espesor depositadas sobre hielo amorfo de agua, con recubrimientos por debajo de la monocapa hasta la multicapa. Se han obtenido distribuciones de energías de desorción. La colaboración con el Dr. Germán Molpeceres de la Universidad de Stuttgart nos ha permitido comparar los valores experimentales con cálculos teóricos de estas energías para el caso particular del acetaldehído.

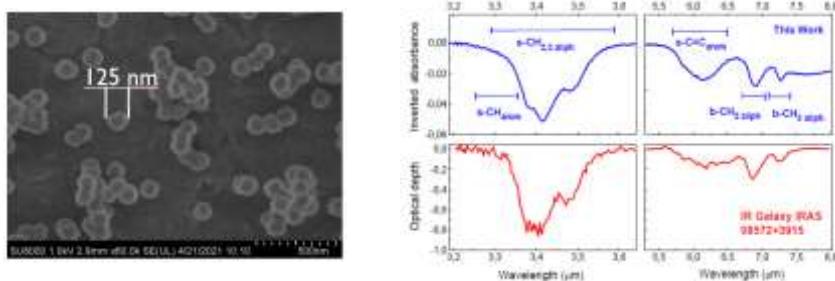
Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico

En colaboración con el ICMM - CSIC, y como continuación de trabajos anteriores centrados en la producción de nanopartículas en condiciones análogas a las atmósferas de estrellas evolucionadas, usando la Instalación Stardust, se han generado mediante pulverización catódica (sputtering) nanopartículas de silicio amorfo hidrogenado. Las medidas de emisión óptica de los plasmas en las proximidades al blanco han permitido identificar los radicales responsables de las primeras etapas de agregación, tales como Si atómico, SiH y SiH₂; mientras que por espectrometría de masas de han

detectado silano (SiH_4) y disilano (Si_2H_6), este último, aún no encontrado en el espacio. A su vez, el tratamiento térmico de depósitos del material generado ha permitido observar la descomposición de estas especies por encima de 500 K, y también comprobar que su exposición a vapor de agua provoca la incorporación de oxígeno, lo que ayudaría a explicar la formación de silicatos en el medio interestelar. Este trabajo ha dado lugar a una publicación en la revista *Astrophysical Journal*.

Generación, procesado y modelado de análogos de polvo interestelar

Continuando nuestra línea de investigación orientada a la generación y estudio de nanopartículas de interés astrofísico, se ha utilizado un método novedoso basado en espectroscopía FTIR para la determinación de la superficie activa de muestras de alta porosidad formadas por depósitos de granos de polvo carbonáceo, produciéndolos en una descarga RF capacitiva en el Laboratorio de Plasmas Fríos, e investigando después la adsorción de CO sobre ellos con un creciente número de monocapas, hasta llegar a la saturación. Esta última parte se ha realizado en el Laboratorio de Hielos, usando una cámara de UHV y observando la variación de picos característicos en los espectros FTIR.



Los espectros infrarrojos han permitido constatar el buen grado de similitud de nuestro material con polvo detectado por observaciones astronómicas. Mediante microscopía electrónica se ha podido determinar el tamaño de las nanopartículas, de unos 125 nm de diámetro, y su uniformidad. Este estudio ha dado lugar al Trabajo Fin de Máster de D. Ricardo Carrasco Herrera, que obtuvo la calificación de sobresaliente; y se prevé seguir profundizando en este estudio para su próxima publicación.

Dinámica de reacciones

Se han publicado los primeros resultados sobre los efectos esterodinámicos en las resonancias de forma a muy bajas energías de colisión (< 2 meV) en la reacción F+HD. Se ha proseguido el estudio colisiones a muy bajas energías, dominadas por un número reducido de ondas parciales y de gran interés en dinámica, investigando otros aspectos de la reactividad, en concreto la correlación entre los momentos angulares orbital y total (L, J) en el canal de entrada y la posibilidad de observar efectos específicos de estos momentos angulares en alguno de los numerosos estados internos de los canales de salida de este sistema exotérmico. Este trabajo se ha realizado en el marco de la Unidad Asociada CSIC-UCM.

Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico

Se ha completado el análisis y finalizado la publicación del estudio de los complejos $\text{He}-\text{CH}^+$ y He_4-CH^+ , en colaboración con O. Asvany and T. Salomon y otros miembros del I. Physikalische Institute de la Universidad de Colonia. Por otra parte, se han comenzado los trabajos de diseño y primeras fases de implementación de un campo magnético en el reactor de cátodo hueco donde se generan los iones moleculares en descargas eléctricas. El campo magnético, de geometría longitudinal, se crea mediante bobinas solenoides dispuestas coaxialmente con el reactor. También se ha diseñado y construido un nuevo cátodo para evitar corrientes de inducidas de Focault cuando se empleen campos magnéticos oscilantes. Se consiguen campos de ~0.1 T tanto alternos como continuos. Se han comenzado a evaluar las posibilidades que ofrece emplear la modulación de la intensidad del campo magnético como herramienta para discernir las señales espectroscópicas de los iones moleculares de la de especies neutras mucho más abundantes. Debe destacarse la enorme importancia que ha tenido para estos desarrollos el trabajo de los profesionales del taller mecánico del CFMAC, así como del taller de óptica.

ESPECTROSCOPÍA LÁSER

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

La principal línea de trabajo acometida durante el año 2021 en el Laboratorio de Espectroscopía Láser ha consistido en el estudio experimental del sistema colisional formado por las moléculas de N_2 y CO, con el N_2 en el papel de molécula “activa” cuyo espectro se ve alterado por las colisiones y el CO como molécula colisionante mayoritaria ($\text{N}_2\text{-CO}$). Este estudio ha constituido una continuación del que ya se abordó en el año 2020 sobre el mismo par de moléculas con los roles invertidos, esto es, con el CO como molécula espectroscópicamente activa y el N_2 como colisionante (CO-N_2), y cuyos resultados ya han sido publicados.

Desde un punto de vista experimental, este estudio espectroscópico presenta dos peculiaridades. Por una parte, el hecho de que la molécula activa no posea momento dipolar permanente hace que el estudio solo pueda abordarse mediante

espectroscopía Raman o técnicas más complejas como espectroscopía de cuadrupolo, lo que explica en parte que hasta la fecha no existan datos experimentales referidos a este sistema colisional y confiere un valor adicional a los datos obtenidos. En nuestro caso el estudio se ha abordado mediante el uso de la técnica de espectroscopía Raman estimulada. Adicionalmente, y al estar el N₂ presente de forma mayoritaria en la atmósfera, ha sido necesario dotar al dispositivo experimental Raman de las modificaciones necesarias para excluir esta contribución atmosférica.

El interés fundamental del estudio radica en que ha proporcionado datos cuantitativos, en forma de coeficientes de ensanchamiento colisional, para las líneas del espectro Raman rovibracional del N₂, que podrán compararse con los obtenidos a través de simulación por nuestros colaboradores y de esta manera contribuir al refinamiento de los métodos de cálculo en sistemas colisionales. Para ello se realizaron medidas sistemáticas del sistema colisional a varias presiones y tres temperaturas de referencia (77, 195 y 298 K) en la rama Q de la vibración fundamental ($v=0 \rightarrow v=1$) del N₂, y se obtuvieron conjuntos detallados de coeficientes de ensanchamiento colisional a cada una de las temperaturas para cada componente rovibracional Q(J) de esta rama.

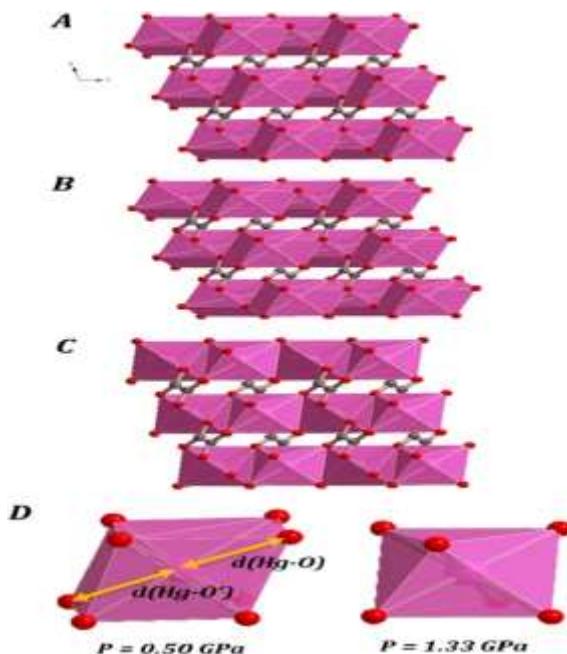
Está planeado que nuestro colaborador el Profesor F. Thibault (Universidad de Rennes) realice los cálculos anteriormente mencionados, que permitirán la comparación entre resultados teóricos y experimentales, a lo largo del año 2022. Hay que resaltar que no es posible utilizar para estos cálculos la misma superficie de energía potencial que se usó en el estudio previo del sistema CO-N₂, ya que las simplificaciones introducidas en su diseño impiden considerar al N₂ como molécula “activa” del par colisional. Por ello, se intentarán evaluar diferentes estrategias de cálculo incluyendo la utilización de formalismos ECS (energy-corrected sudden) sobre sistemas diátomo-diátomo.

Al margen del estudio arriba descrito, en el primer trimestre de 2021 se realizaron también medidas de alta resolución en la banda vibracional fundamental de la vibración v_1 del isotopólogo ¹³CH₄ del metano mediante espectroscopía Raman estimulada a varias temperaturas para la determinación precisa de las posiciones de algunos de sus niveles de energía. Estas medidas forman parte de una colaboración con grupos del Instituto de Óptica Atmosférica de Tomsk (Rusia) y la Universidad de Reims (Francia) especializados en la simulación de espectros moleculares. Los resultados de este estudio conjunto se han publicado en 2021.

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 un comportamiento mecánico anómalo en oxalatos de Mercurio dado que exhibe una compresibilidad lineal negativa como así mismo su coeficiente de Posisson lo que es un indicativo de comportamientos inusuales elásticos ya observados en algunos otros oxalatos y caracterizados por este grupo de investigación.



En el apartado de hielos astrofísicos se ha llevado a cabo una colaboración interdisciplinar con el laboratorio de hielos para modelar las fases sólidas del 2-aminooxazol y urea junto al cálculo del espectro infrarrojo experimental. Resultados que han aportado posibles configuraciones estructurales de estos hielos y han permitido una mejor asignación del espectro IR.

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 nanocomuestos 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:

- Nanocomuestos 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 nanocomuestos.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Nano y microestrucción 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 precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- 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).
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM).
- 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 mecano-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- 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 ORGÁNICOS

Derivados de fulereno

Tras la nanoestructuración de diversos polímeros conductores y semiconductores, hemos demostrado que también es posible generar estructuras superficiales periódicas mediante irradiación láser (LIPSS) en el derivado de fullereno (PC₇₁BM). Además, hemos observado que se produce un efecto de impresión fotoinducida (PRI, del inglés Photoinduced Resist-free Imprinting) en dichas estructuras. La morfología se ha caracterizado por microscopía de fuerza atómica (AFM) y dispersión de rayos X de ángulo pequeño con incidencia rasante usando luz sincrotrón (GISAXS). Mediante simulaciones de los patrones GISAXS se puede obtener información valiosa sobre la naturaleza tanto del LIPSS del fullereno original como de la nanoestructura remanente tras ser lavada con el disolvente de (PC₇₁BM), en términos de geometría, distribución de tamaños, periodicidad de la red y grado de orden. Una de las características más interesantes que proporciona el análisis GISAXS es la estimación del factor de distorsión paracristalina, que puede ser útil para evaluar el nivel de orden en la nanoestructura. Los datos revelaron que los LIPSS de las películas de PC₇₁BM pueden describirse como retículas paracristalinas unidimensionales con niveles de orden acordes con los típicamente observados en los LIPSS de otros materiales. El efecto PRI deja una nanoestructura cualitativamente similar pero aproximadamente dos veces más desordenada que la LIPSS original. Nuestros resultados muestran que la técnica de GISAXS es una poderosa herramienta para caracterizar los procesos mencionados con potencial relevancia en nanotecnología.

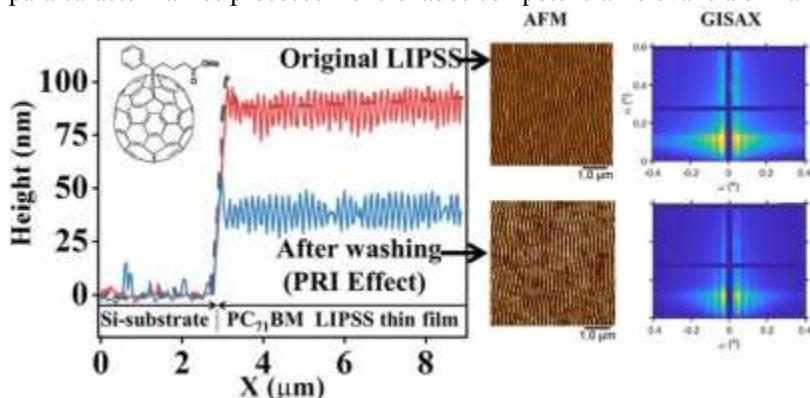


Figura 1. Combinación de experimentos de dispersión de rayos X de ángulo pequeño con incidencia rasante (GISAXS) y de AFM han permitido investigar la nanoestructuración mediante técnicas de irradiación con láser del derivado de fullereno (PC₇₁BM) original y de la nanoestructura remanente tras ser lavada con disolvente.

NANOPARTÍCULAS DE POLÍMEROS SEMICONDUCTOR CON PROPIEDADES ÓPTICAS CONTROLADAS

A partir de métodos físico químicos se han producido nanopartículas de polímeros semiconductor. Mediante la elección del método de preparación, se obtienen dispersiones acuosas de las nanopartículas con diferentes propiedades ópticas. Así, cuando las nanopartículas se obtienen en presencia de surfactante iónico, la dispersión acuosa presenta una emisión que tiende más al azul, mientras que la dispersión preparada sin surfactante presenta una emisión más hacia el rojo. Hemos podido demostrar, mediante técnicas de dispersión de rayos X y calorimetría, que esta diferente emisión está relacionada con la formación de un complejo entre la estructura cristalina del polímero semiconductor y el surfactante.

POLÍMEROS COMPUESTOS Y BIOCOPOLIMEROS BASADOS EN POLIESTERES ALIFÁTICOS Y AROMÁTICOS

Se han preparado materiales poliméricos compuestos basados en polialcohol vinílico (PVA) y oxido de grafeno y estudiado sus propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas. El PVA es un termoplástico sintético derivado de la hidrolisis parcial o completa del poliacetato de vinilo. Los nanocomuestos basados en PVA son demandados en aplicaciones para las que se requiera elevada resistencia a tracción, así como relevantes propiedades eléctricas, térmicas y ópticas. Así mismo, se han preparado y estudiado copolímeros basados en los que se conocen como "biopolímeros" o "bioplásticos". Éstos 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) 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.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

ASPECTOS GENERALES DE LA INVESTIGACIÓN

Hemos ahondado en 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 2020. Se han obtenido resultados 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. Se han desarrollado dos contratos de colaboración con la empresa internacional Total Energies. También hay que destacar la actividad desarrollada en colaboración con investigadores de la UAH, del INTA, de la UG y de la UPV/EHU y cuyos resultados han sido objeto de publicaciones en el año 2020. A continuación, se describen las actividades y resultados principales obtenidos en los diferentes proyectos.

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 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 atomístico. 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 diferencias en la fuerza de la interacción en las diferentes mezclas binarias exploradas hasta ahora. Estos resultados permiten la selección de los materiales más prometedores para futuros estudios sobre estructura, morfología, y reología y 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 se ha llevado a cabo el análisis poliolefinas ramificadas, principales componentes de sistemas multicapa. En este sentido se han publicado los resultados obtenidos mediante simulación por ordenador de la dinámica molecular de las conformaciones de la cadena a diferentes temperaturas en una serie de copolímeros de etileno/1-buteno. Hemos obtenido que el tamaño del ovillo macromolecular, $\langle R_g^2 \rangle/M$, disminuye con el aumento de la concentración de ramas etilo y que el coeficiente de cambio con la temperatura, κ , 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 ayudan 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 publicado un estudio en Langmuir sobre la difusión de nanopartículas de diferente funcionalidad en soluciones acuosas de óxido de polietileno. Los resultados muestran la formación de una capa de PEO 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 atomístico. Los copolímeros de acrilato injertados que funcionalizan la superficie de las nanopartículas, confieren a las mismas una superficie hidrófobica 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. Este trabajo ha supuesto el inicio de nuevas colaboraciones con el POLYMAT y el Departamento de Biología Celular e Histología de la Universidad del País Vasco.

PROYECTO SOBRE ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN DE HER2-BIOSIMILARES

Los receptores de membrana HER2 intervienen en los procesos de crecimiento, división y reparación de las células mamarias. 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 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, 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.

MATERIALES POLÍMERICOS CON TOPOLOGÍAS MACROMOLECULARES NOVEDOSAS

Esta línea surge de la colaboración con una empresa internacional líder en el desarrollo de nuevos materiales. Se han diseñado nuevos experimentos y aplicando modelos teóricos de reciente desarrollo a una serie de materiales de nueva síntesis de arquitectura molecular desconocida. Esta idea surge de la imposibilidad de determinar dicha arquitectura mediante técnicas convencionales. En concreto, esta colaboración se articula en tres actividades genéricas: (i) la obtención de las propiedades reológicas en régimen lineal y no lineal, (ii) la aplicación de modelos computacionales teóricos que permitan determinar la arquitectura molecular correspondiente, y (iii) la identificación de las topologías macromoleculares específicas determinantes de las propiedades medidas.

COLABORACIÓN CON OTROS GRUPOS DE INVESTIGACIÓN

Con el Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de Universidad de Alcalá de Henares se ha investigado sobre las aplicaciones biotecnológicas de nanopartículas de PGMA y sobre el proceso de reactividad de complejos quirales de titanio. En estas colaboraciones se han publicado trabajos en las revistas International Journal of Pharmaceutics y Organometallics. En el primer caso se ha investigado sobre la aplicación biotecnológica de nanopartículas de polimetacrilato de glicidilo (PGMA). El material estudiado muestra propiedades muy sugerentes, como la ausencia total de cristalinidad y un bajo valor de la transición vítreo. En el trabajo se ha demostrado que las nanopartículas de PGMA muestran actividad antibacteriana duradera, biocompatibilidad y capacidad antimicrobiana. Los materiales funcionalizados con PGMA presentan por tanto aplicaciones potenciales como nanoportadores para usos antiinfecciosos. En el segundo trabajo, se sintetizaron nuevos complejos de titanio (IV) portadores de ligandos polidentados quirales basados en α -pineno y ciclopentadienilo en el grupo de la Universidad de Alcalá. Experimentalmente se evaluó la reactividad de derivados alquílicos con reactivos protónicos, encontrando un comportamiento distinto en la reacción con alcoholes y tioles. En nuestro grupo, hemos realizado cálculos utilizando métodos DFT para explicar las observaciones experimentales. Sobre la base de estos cálculos, proponemos que la protonación del nitrógeno del grupo amino en el catalizador conduce al producto de control cinético, mientras que la protonación del enlace Ti-C está bajo control termodinámico. Las diferencias encontradas experimentalmente en la transformación de los derivados alcoxi-alquilo y tiolato-alquilo pueden explicarse sobre la base de las diferentes estabilidades de los productos cinéticos. Así, en el caso de la reacción con isopropanol es suficientemente estable para evitar su evolución hacia el producto termodinámico mediante calentamiento. Sin embargo, el producto cinético en la reacción con el tiol no es suficientemente estable para evitar la formación del producto termodinámico al calentarla.

Con el Centro de Astrobiología CSIC-INTA colaboramos 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 apuntan hacia una clara relación característica entre la microestructura observada por microscopía electrónica y las propiedades reológicas. El comportamiento más llamativo se refiere al observado en microorganismos 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. Los resultados se han publicado en la revista Soft Matter.

Con el Departamento de Microbiología de la Universidad de Granada colaboramos sobre el mecanismo antimicrobiano de la bacteriocina mediante simulación por ordenador. La bacteriocina AS-48 es un potente antimicrobiano, aunque el mecanismo de acción biológica aún no se comprende bien. Se ha realizado un estudio computacional a escala atomística para analizar el mecanismo de ruptura de la membrana. El proceso se basa en un modelo de dos etapas: (1) unión del péptido a la superficie de la bicapa y (2) poración de la membrana debido a la tensión superficial ejercida por el péptido. De hecho, el mecanismo de tensión de la membrana inducida es capaz de explicar la formación estable de poros que conducen a la ruptura de la membrana. La agrupación de residuos catiónicos y las interacciones hidrofóbicas entre péptidos y lípidos parecen ser los causantes del proceso. Se ha demostrado que el aminoácido glutámico (GLU) mejora la capacidad de ruptura de la membrana de la bacteriocina. Las interacciones TRP24-TRP24 también aportan una contribución importante

en las etapas iniciales del mecanismo de poración. La información atomística detallada obtenida de las simulaciones puede servir para comprender mejor las características estructurales de la bacteriocina para diseñar terapias antimicrobianas más potentes.

Con el POLYMAT y el Departamento de Biología Celular e Histología de la Universidad del País Vasco colaboramos en el estudio microrreológico de lágrimas artificiales. Se están realizado investigaciones sobre la aplicación de la técnica de microrreología pasiva por dispersión de luz en medicamentos aplicados al ojo seco (lágrimas artificiales). Las medidas microrreológicas se están comparando con medidas reológica macánicas realizadas por nuestros colaboradores en el POLYMAT.

Chapter 2B

RESEARCH ACTIVITIES

2B.1. THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT**RESEARCH LINES:**

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

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Non-Local Quantum Gravity.
- Gravitational waves.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric non-rigid molecules.
- Formation of volatile organic compounds from organic radicals.
- Photodissociation of organic radicals.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical Physics.
- General Relativity.
- Perturbative field theory and renormalization group.
- 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****Loop Quantum Cosmology**

During 2021, the Gravitation and Cosmology Group has continued the research on the applications of Loop Quantum Gravity to cosmology and black hole physics. Loop Quantum Gravity is a nonperturbative and background independent program for the quantization of General Relativity. Its underlying formalism has been applied successfully to the study of cosmological spacetimes, opening a new area of research known as Loop Quantum Cosmology. The Group is internationally recognized for developing an approach to Loop Quantum Cosmology in the presence of inhomogeneities, called the hybrid approach. This proposal combines the description of a finite number of degrees of freedom using Loop Quantum Cosmology, typically corresponding to a homogeneous background, and a Fock quantization of the field content of the model. An important ingredient is a physical criterion to select a unique vacuum for this Fock quantization. We have put forward a diagonalization of the field contribution to the Hamiltonian constraint in the asymptotic ultraviolet regime as a physically well motivated criterion for this choice of vacuum. During this last year we have revisited and reviewed both the hybrid approach and the asymptotic Hamiltonian diagonalization as two basic corner stones of our contribution to Loop Quantum Cosmology.

We have also advanced in the understanding of the physical properties of the vacuum selected by the condition of asymptotic diagonalization. We have demonstrated that, for phenomenologically interesting effective backgrounds in hybrid Loop Quantum Cosmology, this vacuum provides a power spectrum for the cosmological perturbations that displays no scale-dependent oscillations over time. We have also proved that our condition is compatible in Hybrid Loop Quantum Cosmology with the quantum homogeneity and isotropy hypothesis, proposed by Ashtekar and Gupt to restrict the choice of vacuum state. In our study, we have found a loose step in the construction proposed by these colleagues and suggested the best way to fix it. In addition, we have carried out an analytical study of the main differences between classical inflationary effects of a fast-roll regime and imprints of hybrid Loop Quantum Cosmology on the primordial power spectrum. The effective solutions of interest in Loop Quantum Cosmology typically contain a classical period of kinetic dominance prior to slow-roll inflation, with consequences on the power spectrum that we have told apart from those of phenomena occurring in the vicinity of a bounce in Hybrid Loop Quantum Cosmology. Our results show that, while the two types of effects can lead to a drastic power suppression in the infrared sector of the spectrum, the mode scale at which this happens is much larger for Loop Quantum Cosmology than for classical relativistic cosmology, the corresponding scales being related to the spacetime curvature at the bounce and at the onset of inflation, respectively.

Besides, in order to handle the complexity of the equations obtained in Hybrid Loop Quantum Gravity for the perturbations and for determination of the vacuum with our diagonalization criterion, we have analyzed the leading-order effects that the presence of a scalar field potential causes on the primordial cosmological perturbations in kinetically dominated epochs, in which this potential can be ignored in a first approximation. In this way, we have incorporated these effects of the inflaton potential around a scenario that can be studied quasi-analytically, opening new avenues to study cosmological observables in realistic models.

Finally, we have also applied the techniques of Loop Quantum Cosmology to black hole spacetimes, revisiting an effective geometry which has been recently proposed by Ashtekar and collaborators and examining possible ways to derive it from a Hamiltonian formulation. This is a necessary previous step in order to arrive at a satisfactory quantum formalism for black holes in Loop Quantum Cosmology and the further development of hybrid techniques to treat their perturbations, which can describe the gravitational waves emitted in certain regimes.

Non-local quantum gravity

The Gravitation and Cosmology group is an international leader in the study of non-local quantum gravity with asymptotically polynomial operators, a unitary and renormalizable perturbative field theory. The main advance in 2021 has been the detailed analysis of the stochastic gravitational-wave background coming from the primordial tensor spectrum of a specific realization of the theory. Contrary to what expected in the literature, we have found that the model does not produce an observable stochastic background, since the high-frequency limit reduces to the signal predicted by local Starobinsky inflation. The remainder of the effort of the principal investigator of this approach has been dedicated to the writing of a monographical book on non-local quantum gravity, an ambitious and unique work that will be published by Cambridge University Press.

In parallel, we have started to develop another type of covariant non-local gravity, with fractional operators, which has been one of the main objectives of the group in the past 10 years and that, until now, has been unaccessible due to the technical difficulty of the problem. We have started to study the unitarity and renormalizability properties of this new theory and we will continue to do so in 2022 with more sophisticated methods.

Gravitational waves

The Gravitation and Cosmology group is one of the external groups of the LISA Consortium and is composed by one full and one associate member. We have carried out three important works, two white papers for the Cosmology and the Fundamental Physics Working Group and one research paper on frequency-dependent parametrizations of the waveform of gravitational-waves sources in scenarios of modified or quantum gravity. Presently, these three works are under internal review in LISA and will be published in 2022; the white papers will be published in the prestigious Living Reviews in Relativity. Furthermore, through the active participation in internal committees, we have contributed to the restructuring and reorganization of LISA until the end of phase A of the mission.

Geometric and covariant methods in gravitation

Fernando Barbero and his collaborators at the Universidad Carlos III and Penn State University have continued with the application of geometric methods to the study of the Hamiltonian formulation of field theories, in particular those related to general relativity. In this regard the most important result has been the application of the Gotay-Nester-Hinds algorithm to study the Hamiltonian formulation of the parametrized unimodular extension of the Holst action. As a byproduct of this work a very interesting and concise formulation for tetrad gravity has been obtained. This formulation can be used to get the real Ashtekar formulation for general relativity in a very direct and economic way. Another interesting result obtained in this line of work is the identification of a very efficient method to deal with field theories of differential forms. It relies

in the use of the field equations and a procedure based on pullbacks/projections to derive the Hamiltonian formulation for this type of theories while avoiding many of the complications of the more traditional methods.

The idea of using the field equations is at the core of the so-called covariant methods in field theory. These are very useful to study charges and have been used extensively to analyze problems related to black hole entropy. In this regard we have made use of the so-called CPS (covariant phase space) algorithm to study the equivalence of several gravitational actions (written in terms of metric or tetrad variables) defined in manifolds with boundary and their charges. To deal with these problems we have made extensive use of the recently devised relative framework (by Eduardo Villaseñor and Juan Margalef) and the associated cohomological methods.

CONDENSED MATTER THEORY

Electronic properties of twisted bilayer and trilayer graphene

We have continued our investigation of the broken symmetry phases at the magic angle of twisted bilayer graphene, focusing on the magnetic instabilities in the spin sector. For this purpose, we have applied an atomistic self-consistent Hartree-Fock approach, dealing with the computation of the electron self-energy in real space. This has made possible to discern between the effects of the extended Coulomb and the on-site Hubbard interaction, unveiling an interesting competition between charge instabilities driven by the long-range interaction and spin instabilities arising from the local interaction. We have shown that, at half-filling of the first valence band of the twisted bilayer, there is indeed a phase transition at sufficiently large dielectric screening of the extended Coulomb interaction, marking the onset towards a regime with full spin polarization of the valence band. When the Fermi level is placed at the charge neutrality point, we have shown that there is instead a dominant antiferromagnetic phase with alternating spins at the atomic level, that is, between the two sublattices of each carbon layer. This comes with the opening of a gap in the electronic spectrum, which has to correspond with the insulating behavior observed experimentally at the charge neutrality point of the twisted bilayer.

Furthermore, we have investigated the origin of the unconventional superconductivity discovered recently at the magic angle of twisted trilayer graphene. This phenomenon has shown unusual features, like reentrant behavior under large magnetic fields, which points at a possible electronic mechanism of the pairing instability. In this respect, we have searched for phases with broken symmetry in the electron system, which may arise as a consequence of the large effective strength of the Coulomb interaction at the magic angle. We have found that there is in general a strong tendency towards the breakdown of the valley symmetry, with a concomitant reduction of the symmetry of the bands from C_6 down to the C_3 group. We have shown that the enhanced anisotropy of the low-energy valence bands has a profound impact in the BCS vertex, which develops strong modulations in channels where the effective coupling of the electron-electron interaction turns out to be negative. This is actually the seed needed to induce a pairing instability, which happens to be dominant for the harmonics corresponding to p -wave symmetry, for suitable doping levels of the lowest-energy valence band. This opens a promising way to explain the main experimental observations in twisted trilayer graphene and, beyond that, it also establishes a universal connection between valley symmetry breaking and p -wave superconductivity which may hold in other systems with a valley degree of freedom.

Dissipative quantum many body systems

We continue the research on dissipative quantum many body systems. The time-dependent density matrix in quantum systems weakly coupled to a Markovian environment follows the Lindblad master equation. This master equation defines the Liouvillian as a non-Hermitian superoperator acting on the Hilbert space of density matrices. We presented the exact solution to the Lindblad equation for a non-Hermitian spin problem based on the integrable models of Richardson-Gaudin with a general $SU(N)$ symmetry. This model describes dissipation in a quantum system of coupled multilevel atoms.

Using this exact solution, we study the transition to chaos in terms of a two-parameter Liouvillian, one breaking integrability and one that can make a transition between different limits in the integrable model. The transition is characterized by the spectral statistics of the complex eigenvalues of the Liouvillian operators using two different measures: the nearest-neighbor spacing distribution and the ratios between nearest-neighbor and next-to-nearest-neighbor spacing.s. The first statistics has the advantage that we could derive a phenomenological distribution for intermediate cases between integrability and chaos as a function of one parameter that measures the degree of chaos in the system. However, to make a proper estimation of the parameter first we must do the proper unfolding of the eigenvalues in the complex plane, an operation much more delicate and complex than in the Hermitian case. On the other hand, for the ratios, the main advantage is that the unfolding procedure is not needed, even if its use in mixed systems intermediate between regularity and chaos have not been characterized and calibrated. With our work we confirm that the two measures give consistent results and that the ratios were also appropriate to study the transition to chaos in non-Hermitian systems.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Electron scattering from nuclei. Magnetic form factors

We have studied the sensitivity of the magnetic form factors to structural changes of the nucleus, focusing on the effects related to the evolution and shape transitions in both isotopic and isotonic chains. These form factors can be measured in backward elastic electron scattering from odd-A nuclear targets. The calculations of the form factors have been carried out in the plane wave Born approximation with a nuclear structure based on self-consistent deformed HF + BCS calculations with Skyrme forces. Collective effects are included in the cranking model, whereas nucleon-nucleon correlations are taken into account in the coherent density fluctuation model.

We first look for changes in the experimental ground-state spin and parity (J^π) within odd-Z and even-N isotopic chains, as well as within even-Z and odd-N isotonic chains that would indicate a structural anomaly. We have considered first the chains of odd-A vanadium and aluminum isotopes as examples of spherical and deformed nuclei where J^π do not change, which is the expected behavior. It is shown that the magnetic form factors of the isotopes within these chains are basically the same. Then, we studied isotopic chains of fluorine, manganese, iodine, and cesium, as well as isotonic chains with N=9, N=11, N= 25, and N= 57, where the J^π of the ground-state changes along the chain. The corresponding nuclear structure calculations demonstrate the correlation between a change of the J^π and a shape transition. The calculated form factors exhibit quite different profiles for different deformations that are interpreted as new signatures of shape transitions. Comparison with experiment in the few stable nuclei where this information is available demonstrates the ability of the method to reproduce the data and validates the predictions for unstable nuclei, where no data are available yet.

Beta-decay in heavy and superheavy nuclei

We have analyzed theoretically the Gamow-Teller (GT) strength distribution of the decay of ^{186}Hg into ^{186}Au that has been determined experimentally using the total absorption gamma spectroscopy technique. The theoretical approach is based on deformed pnQRPA calculations using Skyrme forces in a HF+BCS formalism. The interpretation of the results is a complex problem and a challenge for theory because both partners involved in the beta-decay process are immersed in transitional regions, where shapes are changing between neighbours and are mixed in each nucleus. The straightforward interpretation based on a direct comparison with the theory using pure shapes leads to a result that is not consistent with the trends of the measured charge radii around both ^{186}Hg and ^{186}Au . The measured GT strength distribution and the half-life are described by mixing oblate and prolate configurations independently in the parent and daughter nuclei. The best description of the pattern of the measured GT strength is obtained with both parent and daughter nuclei having a mixed character with a dominantly prolate content. These findings further emphasize that ^{186}Hg is located in a transitional region where the shape is changing. The beta-decay properties are dictated by the overlap of the wave functions of parent and daughter partners.

Weak decays in superheavy nuclei with proton numbers Z=118 –120 and neutron numbers N=175 –184 have been also studied within a similar microscopic pnQRPA approach. Z=119 and 120 are the next elements expected to be produced in laboratory and are object of very active theoretical and experimental campaigns. Uncertainties in the Q-energies originated from the unknown masses are translated into uncertainties in the half-lives calculated with them. We have used different mass formulas to evaluate the expected spread on the half-lives. The half-lives of beta-decay and electron capture are compared with alpha-decay half-lives obtained from phenomenological formulas. It is shown that alpha-decay is always dominant in this mass region. Therefore, the beta+/EC-decay mode will hardly compete with alpha-decay in the superheavy nuclei studied. In addition, the competition between alpha and weak decay modes is also studied in the members of several alpha-decay chains starting at different isotopes of Z=118, 119, and 120. The ratio of half-lives for both modes indicates that alpha-decay is generally several orders of magnitude faster than weak decay. However, the half-lives become comparable at the end of some of the chains studied, identifying interesting cases where different decay branches are more likely to appear. This opens the possibility of new pathways through more neutron-rich superheavy nuclei.

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 the one felt by the halo nucleons. In this way, few- and many-body degrees of freedom are combined in a new computationally efficient model applicable to both bound and continuum states and adaptable to different subfields of physics. We formulate a self-consistent three-body model for a core nucleus surrounded by two valence nucleons, where the core is treated in the mean-field approximation and the same effective Skyrme interaction is used between both core and valence nucleons. We apply the model to ^{26}O , where we reproduce the known experimental data as well as phenomenological models with more parameters. The decay of the ground state is found to proceed directly into the continuum without effect of the virtual sequential decay through the well-reproduced $d_{3/2}$ resonance of ^{25}O . We have also investigated two-proton radiative capture reactions by means of the ^{68}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}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.

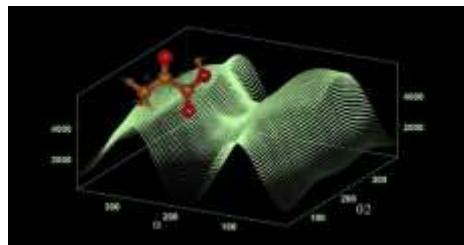
THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS APPLIED TO THE STUDY OF ASTROPHYSICAL SPECIES AND TO THE CHARACTERIZATION OF ATMOSPHERIC POLLUTANTS

During 2021, 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 reactivated. 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 (Fig. 1).

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 nothing 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.

**Figure 1****Figure2**

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 2021, the original code ENEDIM has been upload to treat systems with three or more large amplitude motions. 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 CH₃CO and CH₃COCH₂ radical which have been characterized. In addition, a large work has been performed for the study of C₃O₃H₆ isomers and the pyruvic acid. 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, PID2020-112887GB-I00, and COOPB20364.

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.
- Study of exotic hyper-matter.
- Particle tracking and vertexing methods for high energy nuclear physics experiments.
- Research on machine and deep learning applied to experimental nuclear spectroscopy.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Surface-Enhanced Spectroscopy (SERS, SEF and SEIRA) of molecular systems.
- Nanosensors.
- Spectroscopic techniques applied to the study of materials of interest for the Cultural Heritage.
- Design of ecomaterials.
- Toxicological analysis by spectroscopical techniques.
- Underwater Heritage.

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.
- In-flight spectroscopy of light hypernuclei and exotic hypernuclei.
- Spectroscopy mesonic nuclei.
- R&D in particle tracking and reconstruction in high energy nuclear physics.
- I+D in micro-vertex detectors.
- 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.
- Localized Plasmon Resonances in metal nanostructures (nanoantennas).
- Metamaterials with HRI dielectric materials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Transparent Metamaterials.
- Topological Plasmonics.
- Nanofabrication and functionalization of plasmonic nanostructures.
- Plasmon-assisted spectroscopy characterization of biomolecules on nanostructures.
- Detection of pollutants by SERS.
- Analysis of colorants and pigments by normal vibrational spectroscopy and surface-enhanced vibrational spectroscopy.
- Computational calculations of molecular vibrational spectra.
- In situ material characterization studies.
- Sustainable cements.
- Underwater Heritage.
- Bone analysis based on the application of spectroscopic techniques, Micro-Raman and Micro-FTIR.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE and REX-ISOLDE@CERN.
- Reaction studies at low energy at the 5MV accelerator CMAM@UAM.
- Reaction studies at relativistic energies, the R3B experiment at GSI.
- GEANT4 Monte Carlo simulation of experimental set-up and detectors.
- Gamma spectroscopy.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Spectroscopy of hypernuclei in relativistic energy ion collisions at FRS & SuperFRS at GSI.
- Track and vertex reconstruction algorithms for data analysis of nuclear collisions.
- Pytorch deep learning architectures for particle tracking, classification and observable estimations.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Gas adsorption techniques.
- First principles calculations.
- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Dispersive Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform Raman spectroscopy (FTRaman).
- Portable Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform infrared spectroscopy (FTIR).
- Infrared Attenuated Total Reflectance (ATR).
- Fluorescence Spectroscopy.
- X-Ray Fluorescence (XRF).
- X-Ray Diffraction (XRD).
- Transmission Electron Microscopy (TEM).
- Scanning Electron Microscopy (SEM).
- Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX).
- Optical Spectroscopy (OM).
- Dark-Field Microscopy (DFM).

RESEARCH ACTIVITY:

EXPERIMENTOS PHASE-0 R3B@GSI-FAIR: O. Tengblad, A. Perea (AEI PID2019-104390GB-I00)

Due to the covid-19 situation no travelling to GSI was possible, all preparations for the experiment had to be performed using the local GSI-group with some limited exceptions. A system was arranged in order to maximize on-line support via ZOOM and direct access from outside to the computers and electronics. Also, the shift support and on-line control and analysis of the incoming datastreams were done remotely. Three experiments were performed in periods of 1-2 weeks in March, May and July-August respectively, which gave time for some minor changes of the set-ups used in each specific experiment. A. perea designed the support for the solid secondary target, and the mechanics were produced in Madrid and shipped to GSI to be successfully mounted under our supervision remotely via video-connection.

S455 Fission investigated with relativistic-radioactive beams (J. Benlliure / D. Muecher / J. Taeib)

The experiment was prepared in time; especially the detector systems for p-tracking, SOFIA (fission fragments) and CALIFA (γ -calorimeter) worked fine. However, during beamtime the correlations between detectors could not be worked out in the online data, there were strange extra triggers from CALIFA in the datastream. A special taskgroup was put together and managed to sort out this triggering problem with success in the months following the experiment. Data-analysis is ongoing. **S515 Constraining energy-density functionals** (T. Aumann). The experiment went well, TB of good valuable data on tape. Analysis will be complicated, but contain a lot of physics. CALIFA had an important role giving added value to the obtained data. Analysis is ongoing. **S494 Coulomb Dissociation of ^{16}O into ^{12}C and ^4He** (K. Goebel). This was the longest running experiment, first with 4 days of test beam to calibrate the setup in June, followed by 2 weeks of data-taking in July-August. The experiment is of special interest for the IEM group as it relates and complements the direct reaction study of $^{19}\text{F}(\text{p},\alpha\gamma)^{16}\text{O}$ that we also study at our local accelerator at CMAM. Stellar models show an exceptional sensitivity to the reaction $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$. However, the lowest center-of-mass energy at which this reaction has been studied is 1 MeV, which is about 700 keV above the astrophysical-relevant region. The $^{12}\text{C}/^{16}\text{O}$ ratio in massive stars after He-burning has a huge influence on the successive evolution. The only path from ^4He to heavier elements during the helium burning is the so-called triple-alpha-process, where three ^4He nuclei are fused into a carbon nucleus: $3\alpha \rightarrow ^{12}\text{C}$. This reaction is very unlikely and can, therefore, only occur via a 2-step process populating the very short-lived ^8Be nucleus

($T_{1/2} = 7 \cdot 10^{-17}$ s): $\alpha + \alpha \rightarrow {}^8\text{Be}$ followed by $\alpha + {}^8\text{Be} \rightarrow {}^{12}\text{C}$. Although, the fusion reaction chain is so rare, there is enough time for the freshly produced carbon to react again with the helium nuclei: ${}^{12}\text{C}(\alpha, \gamma){}^{16}\text{O}$. This reaction is, therefore, the key to the understanding of the carbon-to-oxygen ratio after the helium burning phase.

In the S494 we study this astrophysically important ${}^{12}\text{C}(\alpha, \gamma){}^{16}\text{O}$ reaction by measuring the Coulomb breakup of ${}^{16}\text{O}$. The measurements were performed at two different beam energies (500 AMeV and 1000 AMeV) and on several different targets. Huge amount of data was obtained in the experiment and the analysis is ongoing.

In parallel, especially in the fall, the R3B collaboration has been preparing for the experiments to be performed in 2022, where especially we need to implement new silicon detectors surrounding the LH_2 target.

DEFACTO DDetector for Fallout and Air Concentration moniToring: O. Tengblad, (financed by STUK)

Early warning networks are a crucial part of preparedness for nuclear accidents. A comprehensive early warning network enables timely detection of abnormal levels of radioactivity in the atmosphere. This is essential for determining the right protective measures needed to minimize the possibly severe health effects caused by the radiation. Significant amounts of radioactive materials can be released in several types of accidents. This includes severe nuclear accidents such as Chernobyl and Fukushima. In addition to nuclear accidents, explosions of nuclear weapons in air would also release large amounts of radioactive nuclides into the atmosphere. Fires on industrial or medical sites that use strong radioactive sources or terrorist explosions of so-called dirty bombs could also release significant amounts of radioactive nuclides.

The goal of this project has been to develop a novel early warning measurement system capable of providing all necessary information needed to guarantee public safety in case of a nuclear emergency.

In a consortium with the Finnish Radiation and Nuclear Safety Authority (STUK), Helsinki Institute of Physics, and IEM-CSIC we have produced a complete prototype instrument, including hardware and software, for continuous in-situ fallout and air concentration monitoring. Partly based on the IEM-CEPA phoswich detector reported upon in previous Memorias del instituto. The new instrument was developed in 2019-20 and has been thoroughly tested in laboratory measurements and also in long-term field deployment in Finland during 2021, where it has been exposed to different environmental situations as rain, snow, and temperature variations from -25 to + 35 degrees Celcius. The final field test planned to be performed at the Chernobyl site had though, due to the covid-19 situation, to be cancelled. The project has reached its conclusion and the final report to STUK was accepted, presently we are writing up the publication in Open Access, and negotiating with companies to take over the development and produce the commercial version of the equipment.

ERNCIP Radiological and Nuclear Threats to Critical Infrastructure (RN) Thematic Group: O. Tengblad, (European Commission)

In collaboration with colleagues from Finnish radioprotection STUK Helsinki FI , the EC-JRC Ispra (IT), the Federal Office for Radiation Protection - BfS (DE), and University of Ulo (FI) during 2020 and 2021 a status report has been prepared to the European Commission on the *Use of robots at Radiological Crime Scenes*.

The European Union has last decade faced a range of terrorist threats and attacks of a violent nature. Radicalised groups have carried out attacks in the EU with the aim of maximising both the number of victims and the psychological and economic impact on society. In this context, the potential of CBRNE materials is daunting. Radiological and Nuclear agents are not only a health hazard, but may involve higher threats and have societal consequences and/or cause wide-scale damage to the economy and environment. The aim of the report is to address the topic of a “radiological crime scene” within the overarching document *“Requirements and capabilities needed for testing of autonomous robotic equipment carrying measurement devices for the detection of CBRNE threats in a hostile/real life environment”*.

A crime scene is any place connected to a police investigation where police need to secure relevant evidence that could be used in a court of law. A radiological crime scene is a crime scene in which a criminal act or intentional unauthorized act involving nuclear or other radioactive material has taken place or is suspected. The first responders to any emergency and/or terrorist threat need to be aware of eventual RN material on site. Expert support from radiation protection experts and radiological assessors are necessary. First comes the safety of the deployed forces in an all-hazard approach. Further, in case of a crime scene the quality of evidence, including the chain of custody considerations and preventing cross-contamination, are of highest importance.

To approach the problem, the document establishes basic scenarios (indoor, town, open field) in order to assess the needs of the crime scene investigators for support by robots. The report specifically discusses what can a robot assist with at the crime scene, which are the requirements on the robot, which are the limitations when using a robot. The need for training and testing with the novel techniques are discussed and also, the use of artificial intelligence and virtual reality in connection with the use of robots is mentioned. The need to standardization within the European Union to deal with the crime scene management, the use of novel equipment, and finally, the legal aspects when using these techniques at the crime scene. The report is presently in the publish office of the EC.

NEAR COULOMB BARRIER SCATTERING ON ^{208}Pb TARGETS: THE CASES OF ^{15}C AND ^{17}Ne .

(J. D. Ovejas, MJG Borge, O. Tengblad)

The neon isotope ^{17}Ne has a very low two-proton separation energy $S_{2n}=933$ keV, a narrow momentum distribution of the ^{15}O fragment after breakup and a rms radius a 10% larger than its isobars ^{17}F , ^{17}N . All these features hint a two-proton halo structure where none of the two-body subsystems is bound. The first experimental probe of this nucleus at low-energies, i.e. around the Coulomb barrier, was carried out in February 2020 at SPIRAL1, GANIL (Caen, France). The angular distribution of the elastic cross section was determined with high granularity and accuracy thanks to the GLORIA setup and the good beam intensity provided by the facility, $2.2 \cdot 10^4$ pps in average and with no contaminants at all. This last year, the theoretical interpretation of this result has been made in the framework of an Optical Model and taking as reference the equivalent scattering of the stable

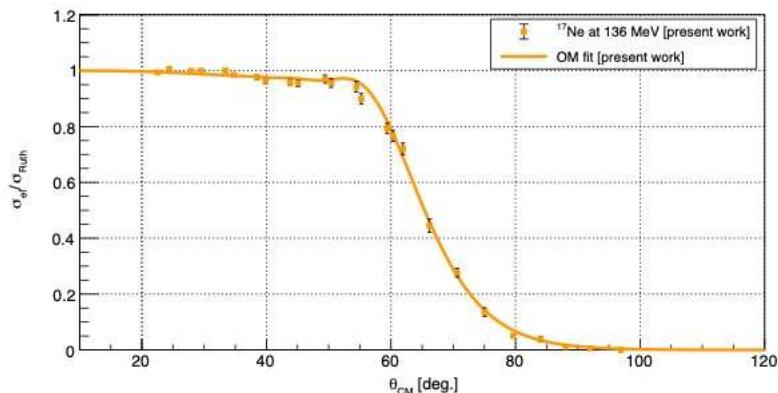


Figure 1. Angular distribution of the normalized elastic cross section for the reaction $^{17}\text{Ne}+^{208}\text{Pb}$ at 136 MeV with the best achieved Optical Model fit.

isotopes $^{20,22}\text{Ne}$. A similar absorption at forward angles is found in the three cases but the intensity of the Coulomb-nuclear interference decreases as one gets far from stability, completely vanishing in the case of ^{17}Ne . An imaginary surface potential with large diffuseness recreates the long-range absorption patterns of the cross sections and different volume depths adjust the interferences. The best fit is shown in Figure 1 and the optimum potential parameters in Table 1.

Table 1. Optical Model parameters for the best fit of the differential elastic cross section. Volume diffusenesses $a^v=0.55$ fm and surface one $a^s=5.5$ fm. All radii are fixed at $r=1.27$ fm

	V [MeV]	W [MeV]	Ws [MeV]	σ_R [mb]	χ^2/N
^{17}Ne	6.7	68.9	0.045	1953	2.4

These results together with those already described in previous reports of ^{15}C with a target of ^{208}Pb have constituted the subject of Javier Diaz Ovejas' thesis defended in December 2021.

EXPERIMENT P01047 y P01066: EXPERIMENTAL STUDIES OF NUCLEAR REACTIONS OF ASTROPHYSICAL INTEREST: ALPHA CLUSTERING IN LIGHT NUCLEI. CMAM, MADRID (V.G. Távora, O. Tengblad, J.A. Briz, M.J.G. Borge, A. Perea)

The $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ reaction is of great importance for Nuclear Astrophysics because of its relevance in both, determining the proportion of carbon that is transformed into oxygen, and the nucleosynthesis of 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 is still too high. Because in the energy region of interest there is no natural parity state that serves as resonance for the direct radiative capture of $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$, the total cross section is determined by the sum of the resonance tails and direct captures of the ground and excited states of ^{16}O . So we used the $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$ reverse nuclear reaction to populate and determine the widths of the unbound states emitting a of ^{16}O .

Since the acquisition system used in the experiment carried out at the Centro de Micro-Análisis de Materiales (CMAM) to study the $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$ reaction was used for the first time, a new data conversion software was developed for the analysis the data. These data are still in the analysis stage, however a preliminary identification of the origin levels of the α particles emitted in the reaction has been carried out, as well as a study of the events in coincidence between the different detectors of the experimental assembly. The analysis of this data will continue.

In February 2021 another experiment was conducted using the same experimental setup in order to study the ${}^7\text{Li}(3\text{He},\text{p}){}^9\text{Be}$ reaction, since a possible way to estimate the effective cross section of the ${}^7\text{Li}(\text{t},\text{n}){}^9\text{Be}$ reaction is to infer it from the similar reaction using instead a ${}^3\text{He}$ beam onto a Li-target. In addition, it is a complementary to the IS659 experiment of ISOLDE (CERN) on the beta decay of ${}^9\text{Li}$.

The experimental assembly consists of 14 pixelated silicon detectors in 2x2 that cover forward angles from 27° to 87° , 3 multi-segmented silicon detectors in 16x16 that cover from 82° to 171° backwards and after these 3 silicon PAD detectors, which configures a telescopic system that allows the identification of particles emitted in the two possible reaction channels: ${}^7\text{Li}({}^3\text{He}, \text{p}) {}^9\text{Be}$ and ${}^7\text{Li}({}^3\text{He}, \text{d}) {}^8\text{Be} \rightarrow 2\alpha$.

The experimental data are in the analysis phase; the identification of particles (Fig. 1) and thus the two reaction channels are identified and can be separated. The next step is to identify exactly the energy level of origin of the different particles identified utilizing the kinematics of the reaction.

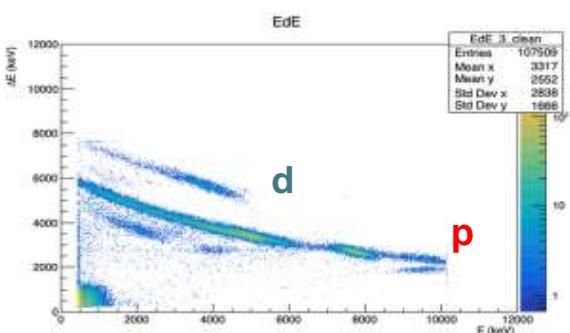


Figure 1. Representation of the "bananas" of particle identification thanks to the telescopes arrangement of the experimental setup. The deuterons and protons emitted of the two indicated reaction channels can be seen.

PRONTO-CM Project (B2017/BMD-3888 Comunidad de Madrid y Horizon2020:ENSAR2-PASPAG)
(J.A. Briz, M.J.G. Borge, O. Tengblad, V. García, A. Perea)

The arrival of the proton therapy technique to Spain in 2020 (at Quirónsalud and Clínica Universitaria de Navarra) and the new centers approved motivated new research activities. The objective of our activities is to design a prototype of proton scanner using the proton Computerized Tomography technique (proton CT). The use of this technique would allow to increase the accuracy of proton therapy treatment plans and a better control of the doses applied by reducing the uncertainties in the range of protons with respect to images obtained using conventional CT with X-rays. This is mainly due to the fact of being using the same particle for planning and treatment.

Our group worked both at the IEM laboratory and performing Monte Carlo simulations with the aim of optimizing the experimental setup before the performance of an experiment at a proton-therapy center. In June 2021, our group at IEM carried out an experiment at the Cyclotron Centre Bronowice (CCB) in Krakow (Poland). Radiographs of several samples with spatial patterns built in aluminium inserted in a matrix of polymethyl methacrylate (PMMA). Additionally, tomography scans of objects built with PMMA and including inserts of water and ethanol and another with a spatial pattern of holes were performed. Proton beams of 100 MeV for radiographs and 110 MeV for tomographs were used. The results obtained for the radiographs are shown in the image below. The experimental results were presented at international Conferences (ANIMMA 2021 and ANPC 2021) and they have been partially published.

The group continues analyzing the data by performing tomographic reconstruction aiming at optimizing the reconstruction algorithms used and obtaining the best possible images in order to evaluate the properties and potential of our device. A new experiment is already planned for next year, 2022, at the CCB facility. In this future experiment very relevant aspects such as the determination of Relative Stopping Powers (RSP) of different materials and the influence of Multiple Coulomb Scattering on the reconstructed images will be assessed in a further step towards a final implementation at clinical level.

Master's theses @ FNEXP

During 2021, three master's theses were carried out in the framework of the project "Proton therapy and Nuclear Techniques for Oncology" (PRONTO) funded by the local government of Madrid, with reference B2017/BMD-3888.

1) Experimental tests of a scanner prototype for medical imaging with protons developed at IEM

Amanda Nathali Nerio Aguirre, Erasmus Mundus Joint Master's Degree in Nuclear Physics.

The proton imaging scanner prototype that was developed at IEM-CSIC was composed by a tracking system of two double-sided silicon strip detectors of $1000\text{ }\mu\text{m}$, and the CEPA4 detector as the residual energy detector, as shown in Fig. 1(a). The imaging capabilities of the proton CT (pCT) scanner prototype were studied at the Cyclotron Centre Bronowice (CCB) in Krakow, Poland, in June 2021. Images of uniform thickness phantoms (Fig. 1(b)) were obtained and analyzed using ROOT and ImageJ. With the use of this pCT scanner prototype, the materials that composed the uniform thickness phantoms were

easily distinguished, displaying great fidelity with respect to the actual shapes (Fig. 1(c)). Moreover, in radiography, the scanner prototype was capable to resolve structures with sizes up to 2–3 mm while using proton beams of 100 MeV and 110 MeV, respectively.

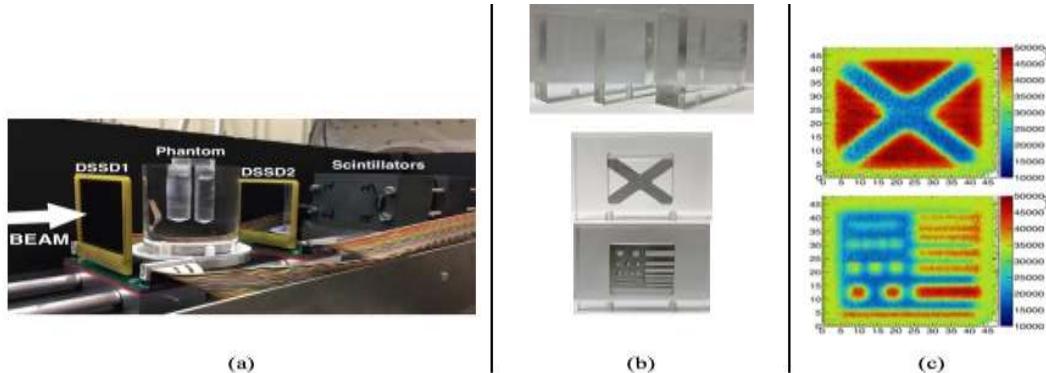


Fig. 1: (a) Experimental setup of the pCT scanner prototype developed at IEM-CSIC mounted on a beam line of the CCB in Krakow (Poland). (b) Uniform thickness phantoms. (c) Experimental two-dimensional plots of the energy lost per hit for the uniform thickness phantoms.

2) Study of radiographic captures of thick phantoms using the prototype proton scanner of the IEM

Carlos Ballesteros Bejarano, Inter-University Master's Degree in Nuclear Physics.

Images of uniform thickness phantoms were simulated with Monte Carlo codes using the simulation toolkit GEANT4. Figs. 2(a) and 2(b) show a detailed description of the experimental system, including all the active and passive elements of the prototype, and the geometry of the uniform thickness phantoms that were imaged, respectively. Simulated images of the uniform thickness phantoms were obtained, and all the materials were clearly distinguished, as it can be seen in Fig. 2(c). A good agreement was achieved between the simulated and experimental results.

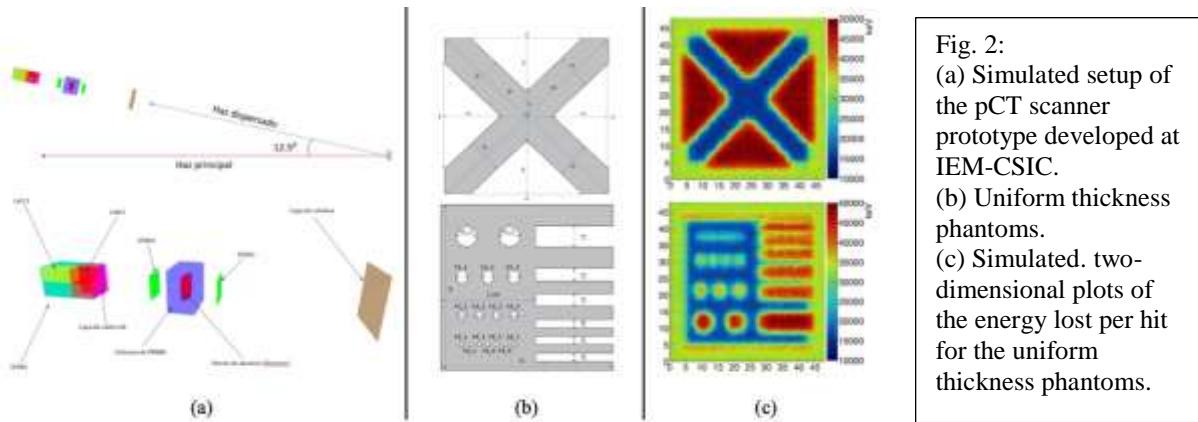


Fig. 2:
 (a) Simulated setup of the pCT scanner prototype developed at IEM-CSIC.
 (b) Uniform thickness phantoms.
 (c) Simulated. two-dimensional plots of the energy lost per hit for the uniform thickness phantoms.

3) Reconstruction of CT images acquired using the pCT scanner prototype of the IEM

Pedro Martínez Moreno, Inter-University Master's Degree in Nuclear Physics.

In this project, the capability for making reconstructions of pCT was studied. Subsequently, Monte Carlo simulations using GEANT4 were performed. The effect on the pCT reconstruction was studied with respect to the statistics of the projection, the number of projections and the reconstruction algorithms. Figs. 3(a) and 3(b) show the sinogram of the imaged phantom for an angular increment of 2°, and the reconstruction of a slice using SIRT algorithm. It was possible to obtain a good outcome using conventional CT reconstruction algorithms for projections with at least 151 protons per square centimeter and 18 projections. pCT reconstructions using SIRT algorithm resulted in images with more contrast and higher spatial resolution.

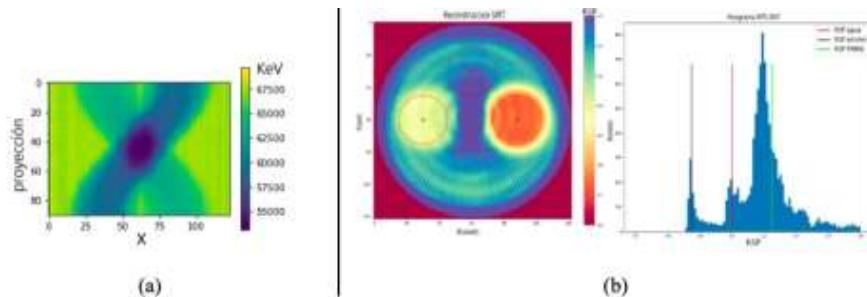


Fig. 3: Simulated results for the tomographic reconstruction of a cylindrical phantom of PMMA, water and alcohol. (a) Sinogram of the phantom using 2° angular increment. (b) Reconstruction of a phantom slice normalized to the RSP of water (yellow circle) and histogram of RSP values, displaying the average value for the water, alcohol and PMMA ROIs.

DeepHyp - DEEP LEARNING TECHNIQUES FOR THE STUDY OF EXOTIC HYPERNUCLEI (Project 2019-T1/TIC-13194 TALENTO M1 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.

HYP@FRS = MACHINE LEARNING METHODS APPLIED TO THE SPECTROSCOPY OF HYPERNUCLEI: THE PUZZLE OF THE HYPERTRITON LIFETIME AND OF THE NNLAMBDA EXISTENCE STUDIED AT WASA@FRS, (PID2020-118009GA-100, C. Rappold, S. Esrig Lopez)

The goal of Hyp@FRS is to study precisely light hypernuclei with ion-induced reactions by employing the fragment separator of GSI and FAIR facilities in Darmstadt, Germany, as a high-resolution forward spectrometer. The objectives of Hyp@FRS is the improvement of spectroscopy through machine learning. The proposed activity revolves around the WASA@FRS project that takes place at the GSI-FAIR facility. With the upcoming experiment, the proposed project aims to validate or discard the discoveries that we published from our first experimental campaign HypHI – Phase 0. The development of innovative methods in machine learning on the hypernuclear spectroscopy experiments will be carried out. Convolutional neural networks and long short-term memory architectures will be investigated first for the non-linear modeling of ion optics in the magnetic spectrometer, and secondly in the tracking of measured particles in the experimental apparatus. The WASA@FRS experiment is scheduled for March 2022. The data analysis will use the machine learning methods explained above. Additionally, the R&D for the electronic readout of the silicon micro vertex detectors and its construction is carried out by this project. The final goal of the project is to tackle the current hypertriton lifetime puzzle and the confirmation of the observation of the $nn\Lambda$ bound state (a state of two neutrons and a Λ hyperon).

THE NUCLEAR STRUCTURE OF SUPER-HEAVY NUCLEI (FPA2017-84756-C4-2-P, Andrea Jungclaus, J. Luis Egido)

In 2020, 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. In 2021, we extended this study moving from the ground state properties to those of excited states and presented the excitation spectra, i.e. collective band structures, of even-even superheavy nuclei obtained within the same approach (*J.L. Egido and A. Jungclaus, Phys. Rev. Lett. 126, 192501*). As representative examples, we have chosen the members of the α -decay chains

of ^{292}Lv and ^{294}Og , the heaviest even-even nuclei which have been synthesized so far using ^{48}Ca -induced fusion-evaporation reactions. Rapidly varying characteristics are predicted for the members of both decay chains, which are further accentuated when compared to the predictions of simple collective models. Based on the present calculations, the prospect of observing α -decay fine structures in future experiments is discussed.

EXPERIMENT NP1712-RIBF145R1: FIRST GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF THE $T_z=-2$ NUCLEUS ^{56}Zn
 (FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

Excited states in ^{56}Zn were populated following one-neutron removal from a ^{57}Zn beam impinging on a Be target at intermediate energies in an experiment conducted in the year 2019 at the Radioactive Isotope Beam Factory at RIKEN. As the results of a careful data analysis performed by our PhD student Alvaro Fernández, three γ rays were observed and tentatively assigned to form the yrast sequence of ^{56}Zn (*A. Fernández, A. Jungclaus et al., Phys. Lett. B823, 136784*). This turns ^{56}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}Fe , were 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 $A = 58$, $T_z = \pm 2$ pair ^{58}Zn and ^{58}Ni , provided unique information with respect to the size of several isospin-breaking terms in the region above doubly-magic ^{56}Ni .

EXPERIMENT E693@GANIL: REVISION OF THE ALPHA-CLUSTER STRUCTURE OF ^{212}Po
 (FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

A few years ago, a γ -ray spectroscopic study of ^{212}Po was performed at the Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), using the inverse kinematics α -transfer reaction $^{12}\text{C}(^{208}\text{Pb}, ^{212}\text{Po})^8\text{Be}$ and the AGATA spectrometer. The main goal of this experiment was to shed new light on the α -cluster structure of this nucleus and in particular to search for additional excited states which were predicted to exist by α -cluster model calculations. A careful analysis based on $\gamma\gamma$ coincidence relations, performed by our PhD student Álvaro Fernández, allowed us to establish 14 new excited states in the energy range between 1.9 and 3.3 MeV (*A. Fernández, A. Jungclaus et al., Phys. Rev. C104, 054316*). However, to our surprise none of these states can be considered as candidates for the levels predicted by theory. A systematic comparison of the experimentally established excitation scheme of ^{212}Po with shell-model calculations was performed. This comparison suggests that the six states with excitation energies (spins and parities) of 1744 (4 $-$), 1751 (8 $-$), 1787 (6 $-$), 1946 (4 $-$), 1986 (8 $-$), and 2016 (6 $-$) keV, which previously were interpreted as α -cluster states, may in fact be of positive parity and belong to low-lying shell-model multiplets. This major reinterpretation of the structure of ^{212}Po is supported by first direct experimental information with respect to the linear polarization of γ rays and exclusive reaction cross sections.

HIGH-RESOLUTION GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF ^{136}Te WITHIN THE HiCARI PROJECT@RIBF-RIKEN
 (FPA2017-84756-C4-2-P, PhD student Jaime Acosta, Andrea Jungclaus)

In 2015, a first in-flight gamma-ray spectroscopy experiment was carried out at the Radio Isotope Beam Factory (RIBF), at the RIKEN research center (Japan), to study the Coulombian excitation of a ^{136}Te beam on a gold target at relativistic energies (Spokespersons: A. Jungclaus, P. Doornenbal). The main goal of this experiment was to establish a data analysis procedure for this type of experiment and to determine in detail the systematic uncertainties involved in such an analysis. In addition to the characteristic line at 607 keV corresponding to the decay of the first excited 2 $^+$ state of ^{136}Te , an excess intensity was observed for the first time at gamma-ray energies around 4 MeV (PhD thesis of Victor Vaquero, UAM, 2018). This surprising result suggested the existence of a highly collective excited state at an energy around 4 MeV in this nucleus. Unfortunately, the limited energy resolution of the gamma-ray spectrometer used in that experiment made it impossible to accurately determine the energy and the decay pattern of this intriguing new state.

In the fall of 2020, a follow-up experiment (NP1912-RIBF193) was carried out at RIBF, this time using a γ -ray spectrometer consisting of high-resolution germanium detectors (HiCARI), which will allow to determine the properties of the high-lying excited state in ^{136}Te . In addition to the measurements of the inelastic excitation on a gold target, also that on a beryllium target was studied. By comparing the reaction cross sections measured on both heavy and light reaction targets, information about the spin of the state can be obtained. In 2021, the analysis of the data taken in this experiment started as part of the PhD thesis project of Jaime Alcosta. Once the calibrations of all detectors of the setup are determined and clean particle identification plots obtained, in the next step Doppler-corrected gamma-ray spectra will be sorted and compared to realistic Monte Carlo simulation.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

As part of our research on the adsorption and confinement of molecular hydrogen at cryogenic temperatures, in 2021 we have completed an experimental study on the confinement of molecular deuterium within carbon nanotubes. Using our own experimental setup developed in-house in previous years, the structure of deuterium adsorbed on open carbon nanotubes was studied by means of neutron diffraction. Through precise theoretical modeling of the system-scattered neutron signal we have discovered the formation at low temperatures of unexpected one-dimensional (1D) crystals confined within the

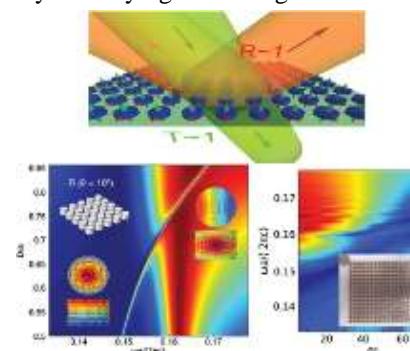
nanotubes. These crystals reach strict one-dimensionality, i.e., all the constituent molecules of the periodic structure can belong to the surface, the structure being non-trivial (is not a one-dimensional chain). The surprising thing about the finding is that the 1D crystal preserves all the symmetries of the bulk crystal compatible with the confinement, that is, it corresponds to a certain restriction (cylindrical) of it. Since the interactions of the molecules with the internal walls of the nanotube are much greater than the interactions between them, the result is against (energetic) conventional wisdom. The finding highlights the extraordinary quantum behaviour of the molecule, both in the translational degrees of freedom (a high quantum delocalization of the center of mass) and the orientational degrees of freedom (an essentially complete quantum delocalization of the molecular axis direction) in such a way that, at present, the calculations, unable to incorporate a full quantum treatment in all degrees of freedom, predict structures dictated by optimal coating of the inner walls of the nanotube, structures that are not observed.

Within the ongoing collaboration with the group of Dr. Leonor Chico (now at the Universidad Complutense), we have extended the study of the surprising electronic structure of single walled carbon nanotubes in their collapsed state. It has become clear that such systems represent a particularly useful instance of what are known as one-dimensional Moire superlattices, displaying all the characteristics of their two-dimensional counterpart, the much-acclaimed twisted bilayer graphene

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 MICINN Excelencia Project MELODIA. Furthermore, we have demonstrated that:

- Si nanodisk dimer metasurfaces with ED/MD resonances can support robust, symmetry-protected BICs at telecom wavelength, experimentally confirmed by the groups of Sunhuke Murai (*Kyoto University*) & Jaime Gómez Rivas (*Surface Photonics, Technical University of Eindhoven*).
- also in collaboration with the group of Jaime Gómez Rivas, the symmetry underlying the emergence of BICs reveals neatly in the local electromagnetic fields, in turn experimentally confirmed for a planar Au rod dimer metasurface through near-field measurements in the THz domain.
- extremely narrow electromagnetic transparency induced by BICs in high-refractive-index disk metasurfaces (see attached figure),, 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*).
- quasi-BICs can be actively tuned and switched on/off through magnetic fields in metasurfaces with proper meta-atoms with magneto-optical activity, in collaboration with Antonio García-Martín (IMN-CSIC).



FUNDAMENTAL OPTICAL PROPERTIES OF DIELECTRIC PARTICLES

In collaboration with the group of Manuel Marqués (UAM), we have demonstrated analytically that guided modes carrying transverse spin density induce optical torques depending on the character, either electric or magnetic, of the dipolar particles. The existence of a nonzero longitudinal extraordinary linear spin momentum modifies optical forces either enhancing or inhibiting radiation pressure. Finally, we show that chiral dipolar particles also undergo lateral forces induced by transverse spin density, amenable to chiral particle sorting.

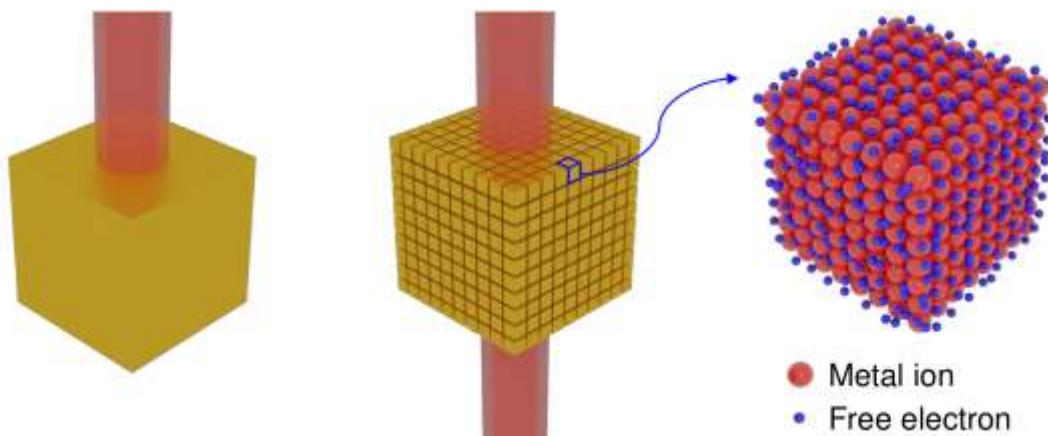
EXTRAORDINARILY TRANSPARENT COMPACT METALLIC METAMATERIALS

Metamaterials are extremely important in advanced technologies, but usually, they rely on the resonant behavior of their constituent blocks. This strongly limits the application of metamaterials to particular frequency band ranges. However, metamaterials with broadband behaviors are highly desirable and are essential for many applications.

Here we explore recently discovered metamaterials that are composed of densely packed metallic nanoparticles but behave as effective dielectrics. Such metamaterials are extremely transparent for all wavelengths within or exceeding the near-

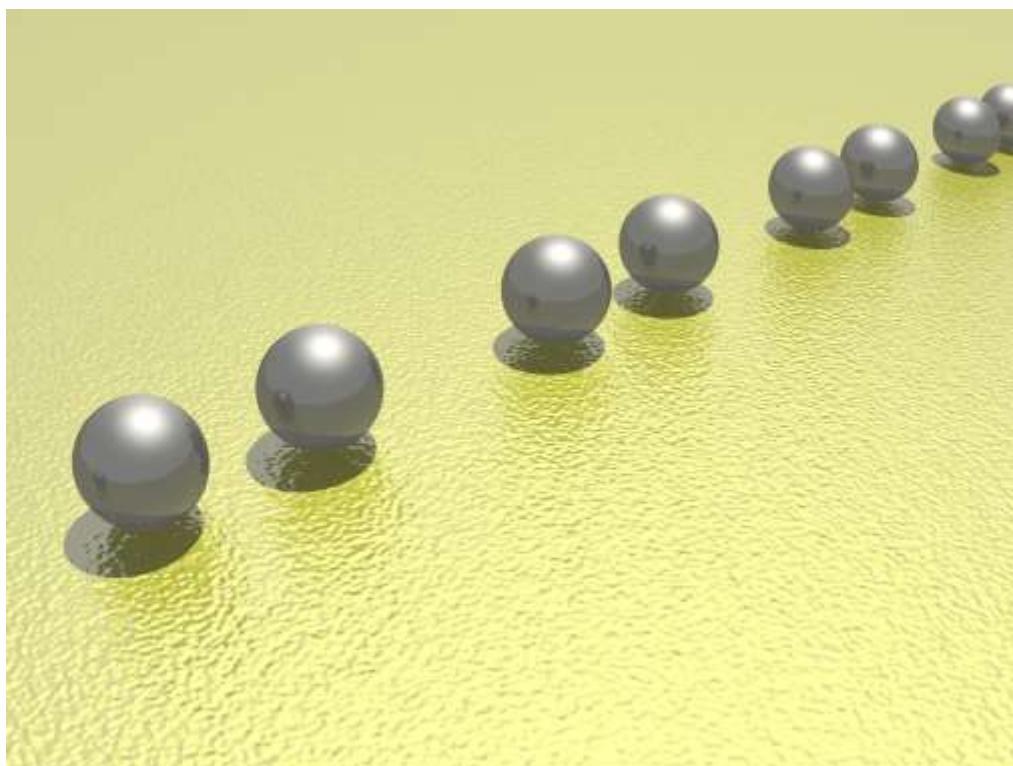
infrared and their performance is constant across an ultra-broadband range of frequencies, which is vital to many devices that operate across the same frequency range. The ability to tune the refractive index of these metamaterials to unnaturally high values while maintaining transparency opens new avenues, such as creating flat, thin metlenses in the terahertz region where only bulk lenses are currently available. To highlight those features, we show several new possible infrared and terahertz applications of these metamaterials which push the boundary of existing technology in photonics.

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.



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.



DESIGN OF NANOSENSORS

The design of sensors based on nanostructures has been one of the main objectives of the experimental work of our group during the year 2021. These sensors require the synthesis of nanostructures with advanced optical properties. The interaction of light of an appropriate wavelength with nanoparticles (NPs) leads to a high enhancement of the local electric field, which is the fundamental principle on which molecular detection by Raman and fluorescence enhanced by nanostructures is based. In recent years we have developed various methods for the synthesis of nanoparticles with interesting applications in spectroscopy and catalysis. Among these nanoparticles are silver nanostars, which present specific morphological properties leading to high intensification of the electromagnetic field.

Furthermore, the design of nanosensors implies a modification of the physical-chemical properties of the nanoparticles through their functionalization. This functionalization can be achieved by self-assembly of organic molecules on nanostructures, which allows increasing the sensitivity and selectivity of the manufactured nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. In this sense, various functionalization strategies based on the use of: a) calixarenes; b) cyclodextrins and c) molecules with a cruciform structure, were carried out.

Calixarenes are characterized by having an internal cavity within which molecules difficult to detect by nanostructure-enhanced Raman spectroscopy (SERS) can lodge. During 2021, the use of new generations of calixarenes continued, characterized by presenting different points of union with metallic surfaces in their structure. These new assemblers were tested for emerging contaminants such as dioxane and glyphosate. These studies were carried out within the framework of the cooperation that our group maintains with researchers from the PJ Safarik University of Kosice (Slovakia) and with the company Saftra Photonics. This last company has licensed the patent developed by our group in the detection of emerging contaminants using SERS.

Cyclodextrins have been used in the functionalization of nanoparticles for the detection of traces of other types of emerging contaminants such as bisphenols. The cyclodextrins used for this purpose need to incorporate thiol groups (-SH) in their structure that allow the anchoring of the macromolecule on the metal surface. Like the calixarenes, these molecules have an internal cavity with different characteristics that allow interaction with molecules that are difficult to adsorb on metals, with the additional advantage of their high biocompatibility, since they are formed by oligomers of glucose units forming cycles of 6, 7 or 8 units.

Finally, cruciform molecules are synthetic substances that have two points of union with metals and an aromatic structure in the middle. These types of molecules act by assembling two nanoparticles, generating points of high field intensification, or hot spots, for which they perform the double function of activating the nanoparticles by assembling them, and capturing

the contaminant that comes to be placed precisely in the high intensity zone. This strategy makes it possible to considerably increase the sensitivity and specificity of SERS detection. The availability of these cruciform assemblers has been possible thanks to the collaboration with researchers from the Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, who have synthesized several of these molecules with different structures including pyridine and thiophene residues in their structure, groups capable of strongly adhering to the metal surface.

PLASMONIC EFFECTS AND BIOMOLECULE ANALYSIS

The excitation of plasmons in nanostructured metals, mainly silver and gold, can be used in the study of biomolecules. This type of analysis allows a characterization of biomolecules at physiological concentrations, which allows their characterization at concentrations similar to the biological media where they are found.

The plasmonic effects analyzed were the following: a) localized surface plasmon resonance (LSPR); b) interparticle hybridization of plasmons, manifested through nanoparticle aggregation processes; and c) the intensification of the electric field induced fundamentally in the points of maximum field intensification located in interparticle spaces or gaps, and in tips generated in fabricated nanoparticles bearing an anisotropic morphology. This last effect is responsible for the SERS technique.

The exploration of these effects has been carried out in different biomolecules. During 2021, we have investigated the adsorption of peptides on nanoparticles of different nature, in particular oligopeptides used in the manufacture of prostheses, and others of great importance in medicine such as the beta amyloid. These latter amyloids are considered to be responsible for Alzheimer's neurodegenerative disease. SERS experiments and other plasmonic effects performed on amyloid peptides with different sequences have revealed the structure that they adopt on plasmonic nanoparticles, which, together with detection at low concentrations, has allowed us to propose a method for analyzing these biomolecules with important therapeutic implications.

Another interesting application of plasmonic effects has been the detection of biomolecules in biological and archaeological materials without the need for their extraction from the matrix materials, which allows the development of an *in situ* analysis method that preserves the original materials. This methodology has been applied in the case of the detection of the natural pigment carminic acid, the most important component of the carmine dye, in archaeological textiles from northern Chile. Star-shaped silver nanoparticles have been used on this type of material, since they generate a greater field intensification than nanospheres. The detailed analysis of the carmine dye in wool textile fibers has also revealed the presence of biological material from cochineal insects, from which the carmine red dye is extracted. Specifically, characteristic nitrogen bases existing in the nucleic acids of these insects were detected.

Silver nanostars have also been used to detect carminic acid in challenging biological materials such as bird feathers. This research has been carried out on the feathers of *Regulus calendula*, a species of bird with a crest of red feathers on its head. The use of star-shaped nanoparticles has revealed the presence of carminic acid in its crest feathers, which indicates that the dye is acquired through the diet of this bird based on cochineal insects during its migratory periods in North America. This research has been conducted thanks to a collaboration with researchers from the University of California Los Angeles (UCLA).

SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF MATERIALS OF INTEREST IN CULTURAL HERITAGE

Within this research line, a comparative study of the SERS detection of negatively and positively charged dyes with similar structures was started. In order to do this, the analysis of blue synthetic dyes of the triarylmethane family will be carried out. Silver nanoparticles used as SERS substrates have a certain negative charge on their surface due to the presence of citrate ions used in the fabrication of the nanoparticles. For this reason, the adsorption of the positively charged molecules is favored, unlike negatively charged ones. Thus, different analytical protocols are needed for the SERS analysis of this two types of organic compounds. This work, carried out in collaboration with researchers from University of Rome La Sapienza, started with the study of two cationic dyes, the triarylmethanes Victoria blue R and B. Different experimental conditions were tested: excitation wavelength, pH and concentration, in order to optimize the protocol for the detection and study of the dyes. Due to the blue color of the analyzed compounds, excitation at 532 nm give rise to more intense SERS spectra, as pre-resonance Raman conditions are met. For this reason, this wavelength was employed for the registration of SERS spectra of a wool fiber dyed with Victoria blue B, being able to identify the dye easily.

During this year 2021, the investigation of iron gall inks present in ancient manuscripts has continued in order to make a discrimination of the different types of inks used in the same document or similar documents, where different inks used by several people can be analyzed. The main objectives of this work were: a) discrimination of iron gall inks in manuscripts written at the same time through the use of Raman, infrared and XRF spectroscopy; b) identification and assignment of the Raman spectral markers of similar writings and their correspondence with the chemical structure of the components; c) evaluation of the effect of aging on the spectral signals in order to find temporary spectral markers, which can contribute to

knowing the approximate age of the writings and the possible subsequent modifications made to the manuscripts over time. This work is being completed with the manufacture of iron gall inks in our laboratory following the recipes found in ancient manuscripts, for later comparison with inks from the historical manuscripts.

Furthermore, we have worked on the application of spectroscopic techniques to the study and characterization of different types of materials used in the synthesis, restoration and conservation of both ancient and modern Cultural Heritage. It is worth mentioning the studies carried out with spectroscopic techniques on pigments from the 15th and 20th centuries, in collaboration with the Universities of PUCMM and UNPHU of the Dominican Republic. In this same project, a study has begun on the characterization of mortars from the colonial period from the second settlement of Colón. The collaboration with IETcc on the synthesis of ecocements with application in 3D printers using construction and demolition waste (CDW) and through different spectroscopic techniques continues. We have collaborated with the European project Innovaconcrete in the study of the effect of new generation additives on the hydration of the majority phases of cement in the early ages of hydration. Finally, the effect of microplastics on the deterioration of underwater heritage is being studied by means of SERS.

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.
- 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 FLUID DYNAMICS

During 2021 we have continued the quantitative study of out-of-equilibrium CO₂ flows, increasing the temperature range up to 1100 K. The vibrational relaxation of CO₂ is a very important process for the radiative transfer within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars, and supersonic gas jets are an extraordinary fertile medium in fluid dynamics, where the study of inelastic intermolecular collisions, the fundamental mechanism of energy transfer in gases, is feasible. The laboratory of Molecular Fluid Dynamics is equipped with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twenty-five years, whose performance and flexibility are unique worldwide.

This year we have tackled a noticeable instrumental improvement. A new fiber laser has been installed, capable of emitting 10 W cw at 532 nm, which entails considerable savings in electrical consumption and cooling compared to the Ar+ laser used up to now. In addition, the narrower width of the new laser beam allows Raman spectra to be recorded with greater spatial resolution, and closer to the nozzle exit orifice.

On the other hand, we have completed the redesigned high-temperature nozzle holder, with new resistive heating cartridges, which allow it to be heated up to 1100 K. This implied: i) machining new inconel nozzles by spark erosion, since the previous ones had welded parts that did not withstand such high temperatures; and ii) sealing the threaded joints leak-tight, for which various ceramic putties and cement-type adhesives were tested. Finally, we had to design a new

thermal protection shield for the micropositioners and other sensitive components within the expansion chamber, as well as a heating protocol compatible with the necessary optical stability of the instrument.

With this new set-up we have continued with the experiments on the vibrational and rotational relaxation of CO₂. We have measured the number densities and the rotational and vibrational temperatures in CO₂ jets from a 0.25 mm nozzle, heated to temperatures of 800, 900, 1000 and 1100 K, as well as the frontal shock wave (Mach disk) of jets from nozzle at 1100 K.

From the analysis of the previous experiments we have been able to measure the breakup of thermodynamic equilibrium between the vibrational, rotational and translational degrees of freedom, as well as their time evolution. The rate coefficients for inelastic rotational collisions J→J-2 of CO₂ have been determined for the first time, and rotational and vibrational relaxation times (different for each level) have been obtained, along with and their contribution to the bulk viscosity.

On the other hand, we have studied the heat capacity of CO₂ under conditions of non-thermodynamic equilibrium (n-LTE). It can be concluded that this quantity, under n-LTE conditions, strongly differs from the equilibrium (LTE) heat capacity and, therefore, ceases to be a proper molecular quantity to become strongly dependent on the local fluid dynamic conditions of the medium. Thus, the adiabatic coefficient $\gamma=C_p/C_v$, widely used in fluid dynamic calculations, loses its meaning and leads to errors, both numerical and conceptual. As an alternative, a formulation has been developed that allows relating the number density and the temperature in a much more precise way.

Finally, a new system, aimed at measuring the flow field (temperatures and densities) in glass microcapillaries by means of Raman spectroscopy, has been designed, to characterize as well the transition from the subsonic to the supersonic flow regime. Despite its scientific and technological interest, the proposed measurements have never been realized up to date. The first tests have yield promising results.

MOLECULAR PHYSICS OF ASTROPHYSICAL SYSTEMS AND PLASMAS

Astrophysical ices

In 2021 we have focused on the study of ices of urea and of ura/water mixtures. The molecule, of great interest in chemistry and biology, is considered a basic species in the prebiotic chemistry of our planet. The hypothesis of an exogenous origin of urea has become more plausible due to its recent detection in the interstellar medium (ISM). The molecule has been detected in the gas phase, but it is likely that its formation takes place in the ice mantels covering the dust grains in the dense clouds of the ISM. Motivated by these findings, we have studied the IR spectra of urea ices generated through vapor deposition at temperatures between 10 K and 270 K. An amorphous solid was obtained for temperatures below 200 K. We have developed theoretical models of amorphous and crystalline urea solids and we have experimentally determined the IR band strengths for the amorphous and crystalline phases. These data are expected to be useful for the detection and quantification of urea in astrophysical ices. The results of this work have been published in *Phys. Chem. Chem. Phys.* Additionally, we have studied the stability of urea towards energetic processing by cosmic rays or ultraviolet photons. For the laboratory simulations, we have used a D₂ lamp providing the UV photons and 5 keV electrons, which induce in the solids a secondary electron cascade. The measured destruction cross sections show this species to be more stable than other compounds of prebiotic interest studied in our laboratory like glycine or methyl isocyanate.

On the other hand, we have started the investigation of desorption energies of complex organic molecules (COMs) present in the ISM from amorphous water ice surfaces. In particular, we have chosen methylamine and acetaldehyde, two species abundantly detected in the gas phase of dense clouds in the ISM. It is postulated that these molecules form in the ice mantles of dust grains, but their presence in the gas-phase of very cold regions can't be easily explained.

The knowledge of the desorption energy of these species from ice surfaces is necessary to understand their formation and evolution. We have carried out experiments of thermal programmed desorption of COMs layers of different thicknesses deposited on amorphous solid water, with values of the surface covering ranging from less than one monolayer to the multilayer. Desorption energy distributions have been derived. Thanks to a collaboration with Dr Germán Molpeceres from Stuttgart University, we have been able to compare the measured values for acetaldehyde with the results of theoretical calculations,

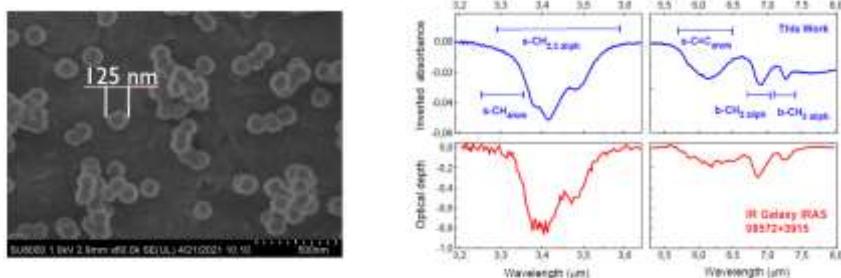
Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance

In collaboration with the ICMM-CSIC, nanoparticles of amorphous hydrogenated silicon were generated through sputtering in the Stardust set-up. These experiments were a continuation of previous works aimed at the production of laboratory analogs of nanoparticles in the atmospheres of evolved stars. The measurement of the optical emission in the neighborhood of the target allowed the identification of the radicals responsible for the early steps of aggregation such as atomic Si, SiH and SiH₂. Silane (SiH₄) and disilane (Si₂H₆) were detected by mass spectrometry. Disilane has not yet been observed in space. Thermal processing beyond 500 K leads to the decomposition of the deposits of hydrogenated amorphous silicon. The exposure of these deposits to water vapor results in the incorporation of oxygen, and suggests a

possible pathway for the formation of silicates in the interstellar medium. The work has been published in the *Astrophysical Journal*.

Generation, processing and modelling of interstellar dust analogs

Within our continuing research line devoted to the generation and study of nanoparticles of astrophysical interest, we have tried a novel method based on FTIR spectroscopy for the measurement of the active surface of carbonaceous dust grain deposits produced in a capacitive RF discharge in the Cold Plasmas Laboratory. To that aim, the samples were placed in a ultrahigh vacuum chamber, and the adsorption of a growing number of CO monolayers was followed until saturation by monitoring specific features of the FTIR spectra.



IR spectra of the laboratory dust analogs were similar to those recorded for interstellar dust. Electron microscopy measurements showed the particles to had a roughly spherical shape with a uniform size ($d \approx 125$ nm). This study constituted the Master thesis of D. Ricardo Carrasco Herrera which passed with “sobresaliente”. The results will be published in the near future.

Reaction dynamics

The first results on stereodynamics in shape resonances at very low collision energies (< 2 meV) for the F+HD reaction have been published. Other aspects of reactivity now been addressed. This energetic range, dominated by a reduced number of partial waves is of great interest in dynamics. In particular, we have focused on the correlation between orbital and total ($L J$) angular momenta and on the possibility of observing specific effects of these angular momenta in some of the numerous internal states of the exit channels of this exothermic system. 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

The study and the publication of the results of the work on He-CH⁺ y He₄-CH⁺ complexes have been completed, in collaboratin with S. Schlemmer, O. Asvany and T. Salomon from the I. Physikalische Institute of the University of Cologne. We have started the work on the design, construction and implementation of a magnetic field in the hollow cathode reactor that is used to form the molecular ions in electric discharges. Longitudinal magnetic fields of ca. 0.1 T both continuous and alternating, are induced via solenoid coils, with a coaxial arrangement. A new hollow cathode has been designed, and a first prototype has been built, in order to avoid eddie currents induced by alternating magnetic fields. We have started the assesment of the suitability of using the modulation of the magnetic field as a tool to tell apart the spectroscopic signals of the molecular ions from those or much more abundant neutral species present in the discharge. It must be noted the great importance of the work done by the professionals of the mechanical and optics workshops of CFMAC to accomplish these developments.

LASER SPECTROSCOPY

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

The main line of work during 2021 in the Laser Spectroscopy Laboratory has dealt with the experimental study of the collisional system formed by the molecules of N₂ and CO, with N₂ in the role of the “active” molecule whose spectrum is altered by collisions and CO as its main collisional partner (N₂-CO). This study is a continuation of the one already carried out throughout 2020 on the same pair of molecules with their roles reversed, that is, CO as the active molecule and N₂ as the collisional partner (CO-N₂). The results of this prior study have already been published.

From an experimental point of view this spectroscopic study presents two peculiarities. The first one is the fact that the active molecule N₂ does not posses a permanent dipole moment, which implies that such a study can only be carried out by means of Raman spectroscopy or more exotic techniques like quadrupole spectroscopy. This explains the lack of experimental data on this collisional system, which in turn lends additional value to the data we have obtained. We have

employed the technique of stimulated Raman spectroscopy. The second peculiarity of the study is the fact that N₂ is a majority component of the Earth's atmosphere, which means that several modifications had to be introduced in the experimental setup in order to get rid of this unwanted atmospheric contribution to the spectra.

The main interest of the study lies in its capacity to render quantitative data, in the form of collisional broadening coefficients, for the lines of the rovibrational Raman spectrum of N₂. These data will be compared to the ones obtained by computational means, and in this way translate into refinements of the calculation methods in collisional systems. To this end, systematic measurements were carried out at several pressures and three reference temperatures (77, 195 and 298 K) in the Q branch of the fundamental vibration ($v=0 \rightarrow v=1$) of N₂, which allowed the obtention of detailed sets of collisional broadening coefficients at each one of the temperatures and for each rovibrational component Q(J) of this branch.

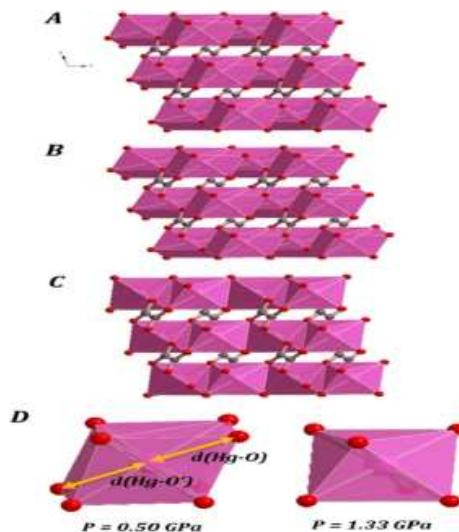
It is planned that our collaborator Professor F. Thibault (University of Rennes) will carry out the calculations mentioned above, which will allow the comparison between experimental and calculated broadening coefficients, throughout 2022. It is worth noting that for these calculations it will not be possible to use the same potential energy surface (PES) already employed in the prior CO-N₂ study: the simplifications introduced in the elaboration of that PES make it unsuitable to simulate a collision in which N₂ is the “active” molecule and CO the passive collisional partner. Instead, our collaborators will evaluate different calculation strategies including the use of ECS formalisms on a diatom-diatom collisional system.

Besides the study described above, in the first quarter of 2021 we also performed high resolution stimulated Raman measurements in the fundamental vibrational band of the v₁vibration of the ¹³CH₄ isotopologue of methane. The objective was an accurate determination of some of this molecule's energy levels. The measurements are part of a collaboration with foreign groups in the Tomsk Institute for atmospheric Optics (Russia) and the University of Reims (France), both of them specialized in the simulation of molecular spectra. The results of this joint study were published in 2021.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

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

By first principles methodology, an anomalous mechanical behavior in Mercury oxalates has been studied due it exhibits a negative linear compressibility as well as negative Posisson coefficient, which is indicative of unusual elastic behaviors already observed in some other oxalates and characterized by previous group research.



In the astrophysical ice section, an interdisciplinary collaboration has been carried out with the ice laboratory to model the solid phases of 2-aminooxazol and urea together with the calculation of the experimental infrared spectrum. Results that have provided possible structural configurations of these ices and better fit of the experimental IR spectra.

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 (DSC).
- Incoherent quasielastic neutron scattering (IQNS).
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy (SEM).
- Raman Spectroscopy.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Microrheology.
- Dynamic mechanical analysis under flexural and tensile deformations: elastic modulus.
- Size exclusion chromatography (SEC) 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.
- Atomic force (AFM) microscopies.
- 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 ORGANIC MATERIALS

Fullerene Derivatives

Following the nanostructuring of several conducting and semiconducting polymers, we have demonstrated that it is also possible to generate periodic surface structures by laser irradiation (LIPSS) on the fullerene derivative (PC₇₁BM). Furthermore, we have observed that a photoinduced resist-free imprinting (PRI) effect is produced on these structures. The morphology has been characterized by atomic force microscopy (AFM) and grazing-incidence small-angle X-ray scattering using synchrotron light (GISAXS). By simulations of the GISAXS patterns, valuable information can be obtained about the nature of both the LIPSS of the original fullerene and the remaining nanostructure after being washed with the (PC₇₁BM) solvent, in terms of geometry, size distribution, lattice periodicity and degree of order. One of the most interesting features provided by the GISAXS analysis is the estimation of the paracrystalline distortion factor, which can be useful to assess the level of order in the nanostructure. The data revealed that LIPSS of PC₇₁BM films can be described as one-dimensional paracrystalline lattices with order levels in agreement with those typically observed in LIPSS of other materials. The PRI effect presents a qualitatively similar nanostructure but about two times more disordered than the original LIPSS one. Our results show that the GISAXS technique is a powerful tool to characterize the aforementioned processes with potential relevance in nanotechnology.

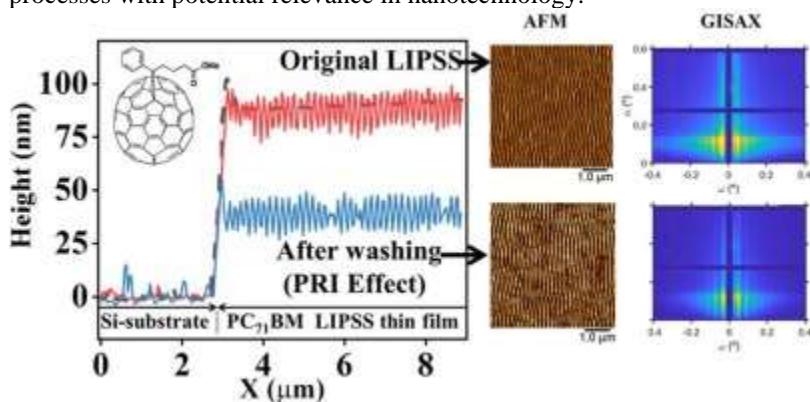


Figure 1. Combination of grazing-incidence small-angle X-ray scattering (GISAXS) and AFM experiments have allowed investigating the nanostructuring by laser irradiation techniques of the original fullerene derivative (PC₇₁BM) and the remaining nanostructure after solvent washing.

NANOPARTICLES OF SEMICONDUCTOR POLYMERS WITH CONTROLLED OPTICAL PROPERTIES

We have been able to obtain semiconducting polymer nanoparticles with tunable optical properties by choosing the appropriate preparation method. Colloids of semiconducting polymer, P3HT, were prepared by two different methods: flash –or reprecipitation- and miniemulsion precipitation technique, which result in the latter case in a polymer–water system whose stability is mediated by an ionic surfactant. Both systems yield different color dispersions, thus different absorption spectra, that is explained to be caused by the influence of the surfactant on the structure of P3HT. Differential scanning calorimetry and synchrotron radiation X-ray diffraction experiments reveal the origin of these optical differences, showing evidences of the formation of a blended structure formed due to the interaction between P3HT and the ionic surfactant. This work evidences the potential use of techniques for preparing nanoparticles in water dispersions as a tool to manipulate the structure and thus, the optical properties of these materials.

POLYMER NANOCOMPOSITES AND BIOBLOCK COPOLYMERS BASED ON ALIPHATIC AND AROMATIC POLYESTERS

We have prepared polymer nanocomposites based on poly(vinyl alcohol) (PVA) and graphene oxide and reduced graphene oxide, at different compositions. Then their mechanical, thermal and electrical properties have been studied. PVA is a synthetic thermoplastic polymer that is made from de partial or complete hydrolysis of polyvinyl acetate. Nanocomposites films based on PVA have been broadly used in applications where high tensile strength, thermal electrical and optical properties are demanded. On the other hand, studies are being carried out on materials known as “biopolymers” or “bioplastics”. These are polymers derived from renewable natural resources or biodegradable polymers. In this sense, the polycaprolactone (PCL), aliphatic polyester, deserves special attention 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 and poly(1,3-propylene terephthalate) (PTT) has been synthetized, at different compositions. PTT, an aromatic semicrystalline thermoplastic, is one of the most important commercial polyester because of its good mechanical and thermophysical behavior.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

GENERAL ASPECTS OF THE RESEARCH

We have continued with the experimental and simulation activities in the project "Eco-design of packaging based on conventional polymers through validated multiscale modeling" granted by the MCINN in mid-2020. Results have been also 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. Two collaboration contracts have been developed with the international company Total Energies. Also noteworthy is the activity carried out in collaboration with researchers from the UAH, INTA, UG and UPV/EHU, the results of which have been published in 2020. The activities and main results obtained in the different projects are described below.

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 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 been performed. In this sense, the published results obtained by simulations of molecular dynamics at different temperatures in a series of ethylene / 1-butene copolymers have shown that the invariant relationship $\langle R_g^2 \rangle / M$ decreases with increasing concentration of ethyl branches and that κ 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 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 published results have shown that the diffusion of nanoparticles of different functionality in aqueous solutions of polyethylene oxide strongly depends on functionality. The final results have shown that the formation of an adsorbed PEO layer onto the carboxylate modified polystyrene particles. 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. The methodology used in this work will be of great interest for certain aspects related to the study of the interaction between polymeric species, related to the development of a simulation platform focused on multiscale modelling of polymers.

PROJECT “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_2), the diffusion

interaction parameter (k_D), 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.

POLYMERIC MATERIALS WITH NOVEL MACROMOLECULAR TOPOLOGIES

This research line arises from the collaboration with a leading international company in the development of new polymeric materials. New experiments have been designed and newly developed theoretical models applied to a number of synthesized materials of unknown molecular architecture. This idea arises from the impossibility of determining the molecular architecture or topology using conventional spectroscopic and chromatographic techniques. Specifically, this collaboration is divided into three generic activities: (i) obtaining rheological properties in linear and non-linear regimes, (ii) the application of theoretical computational methods to determine the corresponding molecular architecture (Monte Carlo simulations), and (iii) the identification of the “active” macromolecular topologies that gives rise to specific rheological properties as shear thinning and strain hardening.

COLLABORATIONS WITH OTHER RESEARCH GROUPS

With the Department of Organic and Inorganic Chemistry of the University of Alcalá de Henares, research has been carried out on the biotechnological applications of PGMA nanoparticles and on the reactivity of chiral titanium complexes. In these collaborations, two articles have been published in the International Journal of Pharmaceutics and in Organometallics. In the first case, the biotechnological application of polyglycidyl methacrylate (PGMA) nanoparticles has been investigated. The studied material shows very suggestive properties, such as the total absence of crystallinity and a low glass transition value. In the work it has been shown that PGMA nanoparticles show long-lasting antibacterial activity, biocompatibility and antimicrobial capacity. PGMA-functionalized materials therefore have potential applications as nanocarriers for anti-infective uses. In the second work, new titanium (IV) complexes bearing chiral polydentate ligand based on α -pinene and cyclopentadienyl moiety were synthesized in the group of Alcalá University. Experimentally, the reactivity of alkyl derivates with protonic reagents were evaluated, finding a distinct behavior in the reaction with alcohols and thiols. In our group, we have performed calculations using DFT methods to explain the experimental observations. On the basis of these calculations, we propose that the protonation of the nitrogen of the amino group on the catalyst leads to the kinetically control product, while the protonation of the Ti-C bond is under thermodynamic control. The differences experimentally found in the thermal transformation of the alkoxy-alkyl and the thiolate-alkyl derivatives can be explained on the basis of the different stabilities of the kinetic products. Thus, in the case of the reaction with isopropanol is sufficiently stable to avoid its evolution toward the thermodynamic product by heating. However, the kinetic product in the reaction with thiol is not sufficiently stable to prevent the formation of the thermodynamic product on heating.

We have collaborated with the CSIC-INTA Astrobiology Center in the rheological study of extremophile biofilms in Rio Tinto. Research has been carried out on the characterization of the rheological properties of biofilms of different microorganisms. The results point to a clear characteristic relationship between the microstructure observed by electron microscopy and the rheological properties. The most striking behavior refers to that observed in mobile microorganisms. These systems show a very characteristic dilatant behavior under shear that probably helps to preserve the structural entity of biofilms under external stresses. The results have been published in the journal Soft Matter.

With the Department of Microbiology of the University of Granada we have collaborated on the antimicrobial mechanism of the bacteriocin through computer simulation. Bacteriocin AS-48 is a potent antimicrobial, although the biological mechanism of action is not well understood. A computational study at an atomistic scale has been carried out to analyze the mechanism of membrane rupture. The process is based on a two-stage model: (1) peptide binding to the bilayer surface and (2) membrane poration due to surface tension exerted by the peptide. In fact, the mechanism of induced membrane tension is able to explain the stable formation of pores leading to membrane rupture. The combination of cationic residues and the hydrophobic interactions between peptides and lipids seem to be the cause of the process. Glutamic aminoacid (GLU) has been shown to enhance the membrane-breaking ability of the bacteriocin. TRP24-TRP24 interactions also make an important contribution to the early stages of the poration mechanism. The detailed atomistic information obtained from the simulations can be used to better understand the structural features of the bacteriocin to design more potent antimicrobial therapies.

We collaborate with POLYMAT and the Department of Cell Biology and Histology of the University of the Basque Country in the microrheological study of artificial tears. Research is being carried out on the application of the passive microrheology technique by light scattering in substances applied to dry eye (artificial tears). Microrheological measurements are being compared with mechanical rheological measurements carried out by our collaborators at POLYMAT and strategies for the application of the technique to biological fluids are being explored.

Capítulo 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Chapter 3
RESEARCH PROJECTS

3.1 DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Superconductividad en materiales quirales.

Code or Reference: PID2020-113164GB-I00

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: José González Carmona and Tobias Stauber (ICMM)

Duration: January 2021-December 2023

Objectives: Study of the mechanism of electronic pairing leading to unconventional superconductivity in twisted bilayer graphene, multi-walled carbon nanotubes, and generically in twisted graphene multilayers.

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 (extended until September 2021)

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.

El Universo Gravitacional Cuántico: Gravedad Cuántica, Cosmología Cuántica de Lazos y Ondas Gravitacionales.

Code or Reference: PID2020-118159GB-C41

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: Gianluca Calcagni and Guillermo A. Mena Marugán

Duration: September 2021-August 2024

Objectives: This project aims to discuss the consequences of the quantum nature of spacetime, extracting predictions that might eventually be falsified. A prominent role will be assigned to the effects of Loop Quantum Gravity, studying its application to cosmology. Similarly, we will explore the cosmological consequences of the multi-fractional theory with fractional derivatives and of non-local quantum gravity. Finally, we will explore the gravitational-wave phenomenology of these theories beyond General Relativity, with special reference to the future interferometers LISA and Einstein Telescope.

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.

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 Sarriugure 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 y gravedad: fronteras, física estadística y efectos de memoria.

Code or Reference: PID2020-116567GB-C22

Funding Institution: MICINN

Main Researcher: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor and Jesús Fernando Barbero González

Duration: September 2021-2024

Objectives: Study different aspects of field theories in bounded spacetime regions and problems in statistical physics.

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. *Participation:* Jesús Fernando Barbero

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.

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 no-rígidas y detectables en atmósferas, mediante métodos ab initio altamente correlacionados.

Code or Reference: PID2020-112887GB-I00

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: María Luisa Senent Diez

Duration: September 2021-August 2024

Objectives: The study of the far infrared spectra of non-rigid molecules of astrophysical and atmospheric interest using highly correlated ab initio methods.

Caracterización espectroscópica de moléculas prebióticas no-rígidas de importancia astrofísica mediante métodos ab initio altamente correlacionados.

Code or Reference: FIS2016-76418-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: María Luisa Senent Diez

Duration: January 2017-June 2021

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 mas 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.

Cold Atom Physics Spain.

Code or Reference: RED2018-102488-T

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Michele Modugno (UPV) *Participation:* Rafael Alejandro Molina Fernández

Duration: January 2020-December 2022

Objectives: Red de átomos fríos española.

3.2 DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPÍA 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.

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.

Dinámica y Estructura de Núcleos Exóticos Estudiados en Experimentos.

Code or Reference: PID2019-104390GB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

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.

Estudios experimentales y teóricos de la estructura de núcleos exóticos.

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

Funding Institution: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad

Main Researchers: Andrea Jungclaus, J. Luis Egido

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

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.

Estudios contemporáneos experimentales y teóricos de la estructura nuclear de núcleos exóticos.

Code or Reference: PID2020-118265GB-C41

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researchers: Andrea Jungclaus, K. Wimmer

Duration: September 2021-August 2024

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.

Programa Ramón y Cajal 2017-Física y Ciencias del Espacio.

Code or Reference: RYC2017-22007

Funding Institution: MICIU

Main Researcher: Kathrin Wimmer

Duration: June 2018-May 2021

DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei.

Code or Reference: 2019-T1/TIC-13194

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: March 2020-February 2024

Objectives: Study of exotic hypernuclei in high energy nuclear collisions. Development of machine and deep learning techniques for improving the experimental spectroscopy of hypernuclei.

Hyp@FRS Machine learning methods applied to the spectroscopy of Hypernuclei: the puzzle of the hypertriton lifetime and of the nnLambda existence studied at WASA@FRS

Code or Reference: PID2020-118009GA-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación - Proyectos I+D+i 2020

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: September 2021-September 2023

Objectives: Lifetime of hypertriton. Existence of nnLambda. Development deep learning techniques for tracking in magnetic field & ion-optics. Development of electronic readout for silicon micro vertex detector.

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

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 (extended until June 2021)

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

Óptica de Luz Magneto-Eléctrica in Medios Nanoestructurados Dieléctricos (MELODIA).

Code or Reference: PGC2018-095777-B-C21

Funding Institution: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

Main Researchers: Vincenzo Giannini/José A. Sánchez Gil

Coordinator: José A. Sánchez Gil

Duration: January 2019-December 2022

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.

Nanosistemas plasmónicos orientados a la detección molecular avanzada, biodiagnosis y la teranóstica.

Code or Reference: FIS2017-84318-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: January 2018-September 2021

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.

Multiplexing Molecular Sensing and Dynamics Based on Plasmonic Effects Generated by Nanostructures.

Code or Reference: PID2020-113900RB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: September 2021- September 2024

Objectives: Application of plasmonic effects of nanostructures on the molecular detection of pollutants, biomolecules and materials with interest in Cultural Heritage. Design and implementation of engineering commercial nanosensors based on plasmonic effects.

Técnicas espectroscópicas portátiles aplicadas al estudio de ligantes y enlucidos de cal del Patrimonio del Caribe.

Code or Reference: COOPB20548

Funding Institution: Agencia Estatal CSIC

Main Researcher: M. Sagrario Martínez Ramírez

Duration: January 2021-December 2022

Objectives: Study and design of repair mortars for the Vega Vieja and Santo Domingo Cathedral.

Mitigación del calentamiento urbano en Iberoamérica a través de la respuesta termoóptica de los materiales de construcción.

Code or Reference: INCGL00008

Funding Institution: Agencia Estatal CSIC

Main Researcher: Gloria Pérez Álvarez-Quiñones

Duration: January 2021-December 2023

Objectives: Identification of strategies to mitigate overheating in Latin American cities by means of sustainable surface finish materials with thermo-optical properties.

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 Mª 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: Ministerio de Economía y Competitividad. 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: María 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.

Linking ice, gas, and dust: laboratory astrochemistry (LILAC).

Code or Reference: Programa i-LINK+2020, CSIC. Referencia LINKA20353

Funding Institution: CSIC

Main Researcher: Belén Maté Naya

Duration: January 2021-December 2022

Objectives: Acquisition of experimental and theoretical information on ices containing complex organic molecules (COMs) to help to understand the formation and evolution of some of the COMs detected in the interstellar medium and in comets in our solar system; 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 cold plasmas with astrophysically relevant species; study of analogs of interstellar carbonaceous dust.

Ligando gas, hielo y polvo: Astrofísica de laboratorio.

Code or Reference: PID2020-113084GB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researchers: María Belén Maté and José Luis Doménech Martínez

Duration: September 2021-August 2024

Objectives: Astronomical observations with cutting-edge instrumentation, laboratory high level experiments, theoretical work and models provide the tools to unveil our astrochemical origins. Expert teams in all these disciplines join forces in this project to study interstellar carbonaceous materials, ices and molecules, as they are key ingredients in astrochemical and astrophysical processes, as well as precursors of life on Earth.

3.4 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR MACROMOLECULAR PHYSICS

Multidimensional micro and nano structuring of polymer materials by advanced technologies: from the fundaments 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.

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

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.

Multiscale modeling of multilayer structures of polymers to improve recyclability.

Funding Institution: CSIC

Main Researchers: Fco. Javier Ramos

Duration: December 2020-December 2021

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 2023

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-February 2022

Objectives: Rheological characterization of polymeric samples

Molecular characterization by elongation rheological modelling.

Code or Reference: Research Agreement N° 20215368

Company: Total Energies One tech Belgium

Main Researcher: Juan Francisco Vega

Duration: September 2021-August 2022

Objectives: Rheological characterization and computational analisys 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

XX Escuela de Matemáticas del Centro de Ciencias Matemáticas (*International non-UE congress*), Morelia (Mexico – Online), 11-15th of January 2021.

- *Explorando el vacío: el Big Bang y la Física Cuántica* (plenary conference), Guillermo A. Mena Marugán.

Topological Phases of Matter: From Low to High Energy (*International non-UE congress*), Seattle, 1st-19th of March 2021.

- *Quantum Hall Effects in Topological Semimetals* (invited talk), Rafael A. Molina.

Quantum Gravity, Higher Derivatives and Nonlocality (*International non-EU congress*), Tokyo, (Japan – online), 8th-12th of March 2021.

- *Stochastic Gravitational Wave Background in Quantum Gravity* (invited talk), Gianluca Calcagni.

2021 APS March Meeting (*International non-UE congress*), Online congress (USA), 15th-19th of March 2021.

- *Chiral Electronics and Effect of the External Fields in Topological Semimetals* (contributed talk), Yuriko Baba, Álvaro Díaz, Enrique Benito-Matías, Gloria Platero, Elena Díaz, Francisco Domínguez-Adame, and Rafael A. Molina.
- *Time-Reversal Symmetry Breaking vs Spin-Polarized Phase from Screening of Coulomb Interaction in Twisted Bilayer Graphene* (contributed talk), José González and Tobias Stauber.
- *Chirality in Twisted Bilayer Graphene* (contributed talk), Tobias Stauber, José González, Tony Low, and Guillermo Gómez-Santos.

Iberian Cosmology Meeting 2021 (*International non-UE congress*), Coimbra (Portugal – Online), 29th of March-1st of April 2021.

- *Cosmological Perturbations on Top of Loop Quantum Backgrounds* (contributed talk), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

Quantum Information in Spain (ICE-6) (*National congress*), Online, 12nd-13th of May 2021.

- *From Integrability to Chaos in Open Quantum Systems* (contributed talk), A. Rubio-García, R.A. Molina, and J. Dukelsky.
- *Rashba Coupling and Spin Switching in Dirac Semimetals* (poster), Yuriko Baba, Francisco Domínguez-Adame, Gloria Platero, and Rafael A. Molina.

International Symposium on Molecular Spectroscopy 71st- Champaign-Urbana, Illinois (*International non-UE congress*), Online, 21st-25th of June 2021.

- *Ab Initio Calculation Applied to the Study of Organic Non-Rigid Molecules with (at least) Three Interacting Torsional Modes* (invited talk), M.L. Senent.

Sixteenth Marcel Grossmann Meeting - MG16 (*International non-UE congress*), Roma (Italy – Online), 5th-10th of July 2021.

- *Revisiting the Hamiltonian Formalism of the Ashtekar-Olmedo-Singh Black Hole Model* (contributed talk), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Primordial Perturbations in Kinetically Dominated Regimes of Classical and Quantum Cosmology* (contributed talk), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués, and Rafael Jiménez-Llamas.

Gravitational Wave Probes of Physics Beyond Standard Model (*International non-EU congress*), online, 12th-16th of July 2021.

- *Gravitational Waves and Quantum Gravity* (contributed talk), Gianluca Calcagni.

XXVIII International Conference on Supersymmetry and Unification of Fundamental Interactions (SUSY 2021) (*International non-EU congress*), online, 23rd-28th of August 2021.

- *Probing Spacetime Geometry with Gravitational Waves* (contributed talk), Gianluca Calcagni.

Spanish-Portuguese Relativity Meeting – EREP2021 (*International non-UE congress*), Aveiro (Portugal – Online), 13th-16th of September 2021.

- *Asymptotic Hamiltonian Diagonalization in Hybrid (Loop) Quantum Cosmology* (contributed talk), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués, and Thomas Thiemann.

- *Effects of a Scalar Field Potential on Primordial Perturbations in Hybrid (Loop) Quantum Cosmology* (contributed talk), Beatriz Elizaga Navascués, Rafael Jiménez-Llamas, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Relativistic vs. Loop Quantum Effects in the Primordial Power Spectrum* (contributed talk), Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Investigating an Alternative Hamiltonian Derivation of the AOS Black Hole Solution* (contributed talk), Alejandro García-Quismondo and Guillermo A. Mena Marugán.

COST CA18108 First Training School (*International EU congress*), Corfù (Greece), 27th of September–5th of October 2021.

- *Cosmology I & II* (invited lectures), Gianluca Calcagni.

ET-Spain Meeting (Nacional), Madrid, 8th of October 2021.

- *IEM* (contributed talk), Gianluca Calcagni.

Probing Quantum Complex Dynamics through Out-of-time-ordered Correlators (*International non-UE congress*), Dresden, 11th-15th of October 2021.

- *Thouless Energy and Diagonal Fluctuations around the Many-Body Localization Transition* (poster), Rafael A. Molina, Ángel López Corps, and Armando Relaño.

8th Korea-Japan Workshop on Dark Energy (*International non-EU congress*), online, 18th-22nd of October 2021.

- *Dark Energy in Multifractional Spacetimes – Reloaded* (invited talk), Gianluca Calcagni.

Cold Atom Workshop 2021 (*National congress*), Granada, 25th-26th of November 2021.

- Constant of Motion Identifying Excited-State Quantum Phases: Application to the Rabi and Dicke Models (invited talk), Ángel López Corps, Rafael A. Molina, and Armando Relaño.
- *Thouless Energy and Diagonal Fluctuations around the Many-Body Localization Transition* (poster), Rafael A. Molina, Ángel López Corps, and Armando Relaño.

Jornada de doctorandos 2020-2021 (*National congress*), Madrid, 9th-10th of December 2021.

- *Espintrónica quiral en semimetales topológicos* (invited talk), Yuriko Baba, Francisco Domínguez-Adame and Rafael A. Molina.

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

Reunion ERNCIP Tematic group, 2nd of February 2021, (ZOOM) O. Tengblad

NUSTAR week 23rd-26th of February 2021, (ZOOM) O. Tengblad, MJG Borge, C. Rappold

Hadron in Nucleus 2020 (HIN20): 8th-10th of March 2021, C. Rappold

Jornada de doctorandos de primavera de la UCM, 14th-16th of April, S. Escrig López

Strangeness in Quark Matter Conference 2021: 17th-22nd of May, 2021, C. Rappold

Reunión comité científico Canfranc LSC, 9th-10th of September, 2021, (ZOOM) O. Tengblad, MJG Borge

Super-FRS Exp. Collaboration Meeting 2021, 22nd-24th of September 2021 (ZOOM) C. Rappold, S. Escrig

NUSTAR meeting 6th-8th of October 2021, (ZOOM) O. Tengblad, MJG Borge, C. Rappold

Reunión comité científico Canfranc LSC, 29th-30th of November 2021, (ZOOM) O. Tengblad, MJG Borge

ANIMMA 2021, (*International non-UE congress*), Online 21st-25th of June 2021.

- *A prototype of pCT scanner: first tests (poster with short oral presentation)*, J. A. Briz, I. Posadillo, V.G. Távora, E. Nácher, M.J.G. Borge, O. Tengblad, A. Perea, A. Ortiz, J. D. Ovejas, and S. Viñals.

R3B meeting 13rd-17th of December 2021, (ZOOM) O. Tengblad, C. Rappold

ISOLDE Workshop and Users Meeting 2021, 14th-16th of December, 2021, (ZOOM) MJG Borge, JA Briz

Introduction to Deep Learning for Nuclear Physics, (ZOOM), Helmholtz Ai Consultant-Unit, Dresden (Germany), 13th-15th of October 2021, Daniel Fernandez Ruiz, Vicente García Távora, JA Briz Monago, S. Escrig López.

African Nuclear Physics School, (ZOOM), iThemba LABS-Johannesburg (South Africa), November 8th-12th, 2022

- *R-matrix analysis of experiment IS633* (oral presentation), Daniel Fernández Ruiz.
- *Experimental studies of nuclear reactions of astrophysical interest: Alpha-clustering in light nuclei* (oral presentation), Vicente García Távora.
- *Characterization of a strongly Coulomb-excited state at an excitation energy above 4 MeV in ^{136}Te* (oral presentation), Jaime Acosta Loza.

Laser Precision Microfabrication, (*International non-UE congress*), Online 20th- 23rd of July 2021.

- *Generation, control and formation mechanisms of LIPSS in semiconductors* (Invited talk), J. Siegel, M. García-Lechuga, Y. Fuentes-Edfuf, D. Puerto, R. Zazo, N. Casquero, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés, J. Solís.

Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'21), (*International non-UE congress*), Online 20th- 23rd of July 2021.

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

IMAGINENANO 2021, workshop on Phononics, Photonics, Plasmonics, Magneto-Optics (3PM2021), (*EU congress*), Bilbao (Spain) 23rd- 25th of November 2021.

- *Bound States in the Continuum in all-dielectric resonant metasurfaces* (Keynote talk), D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.

International Conference on Photonics, Optics and Laser Technology 2021, (*International non-UE congress*), Online 11th-13th of February, 2021.

- *Extraordinarily Transparent Compact Metallic Metamaterials.* Vincenzo Giannini

The International Society for Optics and Photonics (SPIE) 2021, (*International non-UE congress*), San Diego, Online 1st of August 2021.

- *Topological quantum dots: a novel platform for THz lasing quantum optics.* Vincenzo Giannini

XXII Congreso Argentino de Físico-Química y Química Inorgánicas. (*International non-UE congress*). La Plata (Argentina) 19th-29th of April 2021.

- *Espectroscopía Raman Intensificada por nanoestructuras y sus aplicaciones en detección molecular, bioanálisis y Patrimonio Cultural* (Plenary talk), S. Sánchez-Cortés.
- *Caracterización de *Aloe maculata* sobre nanopartículas de plata* (Poster). M. Beverina, S.Sánchez-Cortés, F.I. Schabes, J. Zapata-Martínez, G.S. Jaime, M.L. Arias Cassará, M.E. Tuttolomondo

11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy. (*International UE congress*). Krakow (Poland) 23rd-26th August 2021.

- *Raman and Surface-Enhanced Raman Scattering Analysis of Molecular Compounds with interest for the Cultural Heritage* (Invited talk), S. Sánchez-Cortés.

11th ACI/RILEM International Conference on Cementitious Materials and Alternative Binders for Sustainable Concrete (*International congress*), Montreal, 7th-10th of June 2021.

- *Admixture effect on the early hydration of coal mining waste blended cements* (Oral contribution), S. Martínez-Ramírez, L. Caneda, L. I. Leoz Núñez, M. Frias, R. Vigil de la Villa and R. García.

CONPAT 20-21 (*International congress*), Montreal, 19th-21st of October 2021.

- *Nuevos cementos eco-eficientes elaborados con la fracción fina de hormigón reciclado para futuras aplicaciones ingenieriles* (Oral contribution), M. Monasterio, M. Frías, R. García, R. Vigil de la Villa, S. Martínez, L. Fernández, E. Lahoz, I. Vegas, J. Moreno.

EMSLIBS (*International congress*), Gijón, 29th of November-2nd of December 2021.

- *2021Laser Induced Breakdown Spectroscopy and Non Linear Optical Microscopy for Analysis of Historica Glases* (Flash Presentation), M. Martínez-Weinbaum, M. Sanz, F. Agua, D. Morales-Martin, S. Martínez-Ramírez, T. Palomar, M. García-Heras, M.A. Villegas, M. Castillejo, M. Oujja.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

47th Conference of Plasma Physics, European Physics Societ (*International congress*), On-line Conference, 21st-25th of June 2021.

- *Prevalence of non-aromatic carbonaceous molecules in the inner regions of circumstellar envelopes* (Invited Lecture). L. Martínez, G. Santoro, P. Merino, M. Accolla, K. Lauwaet, J. Sobrado, H. Sabbah, R. J. Peláez, V. J. Herrero, I. Tanarro, M. Agúndez, A. Martín, R. Otero, G. J. Ellis, C. Joblin, J. Cernicharo and J. A. Martín-Gago
- *Ionic and neutral kinetics in C₂H₂/Ar RF plasmas during the first stages of formation of interstellar carbonaceous dust analogues*. (Poster), M. Jiménez-Redondo, L. Díaz-Pérez, R. J. Peláez, B. Maté, V. J. Herrero. I. Tanarro.

74th International Symposium on Molecular Spectroscopy (*International congress*), On-line, 21st-25th of June 2021.

- *Rovibrational spectroscopy of the CH⁺-He and CH⁺-He₄ complexes*. (Oral presentation) T. C. Salomon, J. L. Doménech, P. C. Schmid, E. A. Michael, S. Schlemmer, O. Asvany.

27th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy (*International congress*), Cologne, Germany, 29th of August-3rd of September 2021.

- *Rovibrational spectroscopy of the CH⁺-He and CH⁺-He₄ complexes*. (Poster) T. C. Salomon, J. L. Doménech, P. C. Schmid, E. A. Michael, O. Asvany, S. Schlemmer.

1st International Conference Chemical processes in solar-type star forming regions (*International congress*), Turín, Italy, 13th-17th of September 2021.

- *Urea in Astrophysical Environments: IR Spectra and Destruction Cross Sections for Energetic Processing*. (Oral Coontribution). Belén Maté, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, Vicente Timón, Hector Carrascosa, Guillermo Muñoz-Caro, Izaskun Jiménez-Serra.

European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA 2020. Linking dust, ice and gas in space. (*International congress*), Anacapri, Capri Island, Italy, September 26th–1st of October, 2021.

- *The Gas Cell of Nanocosmos GACELA (Gas Cell for Laboratory Astrophysics) A simulation chamber using receivers and observing techniques of radio astronomy*. (Invited Lecture) J. D. Gallego, F. Tercero, J. A. López-Pérez, P. de Vicente, I. Tanarro, J. L. Doménech, R. J. Peláez, V. J. Herrero, J. A. Martín-Gago, B. Alemán, K. Lauwaet, G. Santoro, E. Moreno, C. Cabezas, C. Bermúdez, S. I. Ramírez, J. Cernicharo.
- *Generation of interstellar carbonaceous dust analogs in C₂H₂ plasmas: gas-phase reactions and particle properties* (Oral Presentation), M. Jiménez-Redondo, L. Díaz-Pérez, R. J. Peláez, B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero.
- *2-aminooxazole in astrophysical environments: IR spectra and destruction cross sections* (Poster) B. Maté, Ricardo Carrasco, Vicente Timón, Victor J. Herrero, Isabel Tanarro, Guillermo Muñoz-Caro, Izaskun Jiménez-Serra.
- *Desorption of volatile molecules from two types of interstellar carbonaceous dust analogues* (Poster) B. Maté, M. Jiménez-Redondo, R. J. Peláez, I. Tanarro, V. J. Herrero.

RIVA ONLINE 2019 –XII Iberian Vacuum Conference (*International congress*), On-line conference, 4th-6th of October 2021.

- *Specific Surface Area of Plasma Generated Interstellar Carbon Dust Analogues* (Poster), Belén Maté, Isabel Tanarro, Ricardo Carrasco-Herrera, Julio Santos, Víctor J. Herrero.
- *Polymerization in C₂H₂/Ar plasmas: Time resolved measurements and modelling* (Oral Presentation), Miguel Jiménez-Redondo, Isabel Tanarro, Víctor J. Herrero.

Laboratory Astrophysics Workshop 2021 (*International congress*), Jena (Germany), 22nd-24th of November 2021.

- *Polymerization in C₂H₂ plasmas used for the generation of interstellar dust analogues* (Poster), Belén Maté, Isabel Tanarro, Ricardo Carrasco-Herrera, Julio Santos, Víctor J. Herrero.
- *Physical and Chemical Processes on Interstellar Ice and Dust Analogues: Recent Results at IEM-CSIC*. (Invited talk). Belén Maté.

Jornada de doctorandos 2020-2021 (*National congress*), Madrid, 9th-10th of December 2021.

- Relajación rotacional de CO₂ en jets supersónicos (Invited talk), Carlos Álvarez, Guzmán Tejeda, José María Fernández and Salvador Montero.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

SAXS/WAXS/GISAXS @ DESY Satellite Meeting 19th of January 2021.

- In-situ and In-operando characterization of Additive Fabrication Processes as revealed by Small and Wide Angle X-ray Scattering using Synchrotron Radiation (oral contribution) Tiberio A. Ezquerra.

E-MRS Spring Meeting (International), VIRTUAL Conference, 31st of May-3rd of June, 2021.

- *Photophysical and structural modulation of poly(3-hexylthiophene) nanoparticles via surfactant-polymer interactions (Poster Contribution)* Edgar Gutiérrez-Fernández, Tiberio A. Ezquerra, Esther Rebollar, Jing Cui, Sara Marina, Jaime Martín, Aurora Nogales. (Symposium D).
- *Straightforward patterning of functional polymers by sequential nanosecond pulsed laser irradiation* (oral presentation) Edgar Gutiérrez-Fernández, Tiberio A. Ezquerra, Aurora Nogales, Esther Rebollar. (Symposium H).
- *Local mechanical properties of nanostructured polymer surfaces* Daniel E. Martínez-Tong, René I. Rodríguez-Beltrán, Tiberio A. Ezquerra, Pablo Moreno, Esther Rebollar.

Online International Dielectric Society (IDS) Workshop (International), 6th-9th of September 2021.

- *Relaxation Behavior and Free Volume of Bio-based poly(trimethylene terephthalate)-block-poly(caprolactone) Copolymers as Revealed by Broadband Dielectric and Positron Annihilation Lifetime Spectroscopies* (oral contribution). Tiberio A. Ezquerra.

ALBA II virtual workshop "Coherent, time-resolved and imaging experiments at ALBA II", 4th of October 2021.

- *Probing structure development during "in-operando" processes by time resolved simultaneous Small and Wide Angle X-ray Scattering with synchrotron radiation* invited talk) Tiberio A. Ezquerra.
- *Chair of the session and round table: Coherent and time resolved experiments.* Mari Cruz García Gutiérrez.

PTI+ Plásticos sostenibles para una economía circular (SUSPLAST), Madrid, 18th-19th of October 2021.

- *Presentación del grupo BIOPHYM* (oral contribution), J. Ramos.

4.2. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO VISITORS

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

- ❖ **Mrs. Islem ben Chouika**, Université de Tunis el Manar, Tunisia, 14th of October-29th of December 2021.

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

- ❖ **Mr. Luis Diego Amadasi**, Undergraduate student, 1st of February–30th of June 2021.
- ❖ **Ms. Michela Rampa**, Master student. University of Rome “La Sapienza”, Italy, 12th of April- 6th of August 2021.
- ❖ **Ms. Caterina Zaggia**, Postgraduated student, University of Bologna, Italy, 1st of May–30th of June 2021.
- ❖ **Prof. Jaime Gómez Rivas**, Professor. Technical University of Eindhoven, The Netherlands, 13th-15th of December 2021.
- ❖ **Dr. Juan José Ibáñez**, Scientific Researcher. Institución Milá y Fontanals, IMF-CSIC, Barcelona, 13th-17th of December 2021.
- ❖ **Dra. Fiona Pichon**, Marie Skłodowska-Curie Individual Fellow, Institución Milá y Fontanals, IMF-CSIC, Barcelona, 13th-17th of December 2021.

4.4. VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS (DE UNA SEMANA O MÁS / LONGER THAN A WEEK)

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

Christophe Rappold.

- GSI/FAIR (Darmstadt, Germany) desde 21/05/2021 hasta 04/06/2021.
- GSI/FAIR (Darmstadt, Germany) desde 12/12/2021 hasta 18/12/2021.

Samuel Escrig López.

- GSI/FAIR Helmholde desde 1/05/2021 hasta 25/06/2021.
- GSI/FAIR (Darmstadt, Germany) desde 12/12/2021 hasta 18/12/2021.

Santiago Sánchez Cortés.

- Center for Interdisciplinary Biosciences, Technology and Innovation Park of P. J. Šafárik University in Košice (Slovakia), 4th January- 30th of May 2021. 1st November – 23rd December 2021.
- Dipartimento di Scienze e Tecnologie Agro-Alimentari. Università degli Studi di Bologna (Italia), 22nd – 28th September 2021.

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). 29th January-3rd March 2021 – 11 hours.

Gianluca Calcagni

- *Cosmology* – COST CA18108 First Training School – International – Corfu Summer Institute, Corfu, Greece. 27th September-5th October 2021 – 5 hours.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- *Taller de fenómenos de transporte en la nanoscalas* – Summer School for Master and Advanced Graduate students, Dotentia project (UCM) – National Non-Official – Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid. 1st-9th September 2021 – 6 hours.

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

O. Tenglad, V. García Távora, MJG Borge, J. Briz, J. Díaz, A. Jungclaus, C. Rappold, S. Escrig López

- Máster Interuniversitario en Física Nuclear - Técnicas Experimentales Avanzadas en Física Nuclear, IEM-CSIC, Madrid, 4th-14th may 2021.

María José García Borge y Olof Tengblad

- Tutores *TFM* – Máster Interuniversitario en Física Nuclear (National Official) - UCM.
18th January-30th September 2021 - 600 hours. Estudiantes: Carlos Ballesteros y Pedro Martínez

María José García Borge

- Tutora *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.
15th February-31st May 2021 - 150 hours. Estudiante: Elena Bermejo

María José García Borge y José Antonio Briz Monago

- Tutores *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Ciencias Experimentales (National Official) - URJC.
9th February-24th June 2021 - 500 hours. Estudiante: Katixa Silva

José Antonio Sánchez-Gil

- Tutor *Trabajo Fin de Máster* - Master in ICT and Multimedia Engineering (Photonics)– International – University of Padova. May–August.

Mª Vega Cañamares Arribas

- Tutor *Trabajo Fin de Máster* - Master in Science and Technology for the Conservation of Cultural Heritage – International – University of Rome “La Sapienza”. April–August.

Vincenzo Giannini

- Tutor *Trabajo Tesis*, Topological light-matter interactions at the nanoscale: Controlling THz frequency light with topological insulator nanostructures – International - Imperial College London. Estudiante: Marie Rider.
- Tutor *Trabajo Tesis*, Revealing Hidden Topologies in Photonic Crystalss – International - Imperial College London. Estudiante: Samuel Palmer.
- Tutor *Prácticas Externas Extracurriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.
15th February-15th May 2021 - 150 hours. Estudiante: Adrián Hidalgo

Sagrario Martínez Ramírez

- Espectroscopía Raman y prácticas con el espectrómetro. Ensayos y técnicas no destructivas aplicadas en la diagnosis de las construcciones históricas, Master – National Official, Escuela Técnica Superior de Arquitectura, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, 27th January 2021 – 3 hours.
- Tutora *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Química (National Official) - UAM.
1st January-30th June 2021 – 600 hours. Estudiante: Luis Diego Amadasi

Ana Crespo Ibáñez

- Tutora *Prácticas Externas* - Máster en Materiales Avanzados Nanotecnología y Fotónica (National Official) - UAM.
- 22nd December 2021-15th July 2022 - 375 hours. Estudiante: Eliana Rodríguez

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**José M. Fernández Sánchez**

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares*, Grado en Ciencias Experimentales (National Official), URJC.
- 2nd November 2020-16th February 2021 – 190 hours. Estudiante: Nerea Mota

Isabel Tanarro y Belén Maté Naya

- Tutoras *TFM* - Máster en Nanofísica y Materiales Avanzados (National Official) - UCM.
- 11th January-11th June 2021 - 264 hours. Estudiante: Ricardo Carrasco

Belén Maté Naya

- Tutora *Prácticas Externas Extracurriculares* - Grado en Química (National Official) - UCM.
- 1st March-30th June 2021 - 425 hours. Estudiante: Natalia Vicente

Vicente Timón Salinero

- Tutor *Prácticas Externas Curriculares* - Grado en Física (National Official) - UCM.
- 15th February-6th April 2021 - 148 hours. Estudiante: Beatriz Moreno
- Tutor *Prácticas Externas* - Máster en Astrofísica (National Official) - UCM.
- 15th February-22th June 2021 - 150 hours. Estudiante: Juan Bernete

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**María José Capitán Aranda**

- *Caracterización de Materiales Mediante Grandes Instalaciones* - Máster en materiales avanzados – National Official – Universidad Autónoma de Madrid – 3rd february 2021 – 3 hours.

Francisco Javier Ramos Díaz

- *Simulación Molecular* - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
- 25th February-2nd April 2021 – 14 hours.

Juan Francisco Vega Borrego

- Tutor *Prácticas Extracurriculares* – Materiales – Grado – National Official – Universidad de Alcalá de Henares.
- 15th February-11th June 2021 – 400 hours. Estudiante: Eduardo Herlea
- *Reología* (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
- 11th February-8th March 2021 – 12 hours.

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS**COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS****5.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****Jesús Fernando Barbero González**

- *The Geometric Exegesis of the Dirac Algorithm*. IIT Kharagpur (India). 10th of March 2021.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- *Quantum Hall Effects in Topological Semimetals*, Universidad de Salamanca, 29th of October 2021.
- *From Integrability to Chaos in Quantum Liouvillians*, Universidad de Granada, 24th of November 2021.

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

Sagrario Martínez Ramírez

- *Propiedades Electrónicas del Grafeno*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 11th of February 2009.
- *El uso de la espectroscopía Raman para la identificación de pigmentos*, Santo Domingo, 29th of April 2021.
- *Técnicas portátiles para el estudio de los materiales del Patrimonio Histórico-Artístico*, Santo Domingo, 7th of December 2021.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*, conferencia a estudiantes de Bachillerato, IES Duque de Rivas, Rivas Vaciamadrid (Madrid), 12th of November 2021.
- *Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*, conferencia a estudiantes de Bachillerato Internacional, IES Jose Saramago, Majadahonda (Madrid), 30th of November 2021.

Belén Maté Naya

- *Astrophysical ices in the lab: recent results at IEM-CSIC*, conference at Centro de Astrobiología, CAB-CSIC, Torrejón de Ardoz, (Madrid), 12th of November 2021.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Fco. Javier Ramos Díaz

- *Eco-diseño de envases basados en polímeros convencionales mediante modelización multiescala*, Madrid, 26th of March 2021, Universidad de Alcalá
- *Introducción a Materials Studio en la Investigación Química y Ciencias de los Materiales. Sesión teórica y Práctica*, Webminar para la Universidad de Córdoba, 8th of April 2021 (4 horas).
- *Casos de estudio usando Materials Studio e Introducción a modulos específicos dentro de Materials Studio*, Webminar para la Universidad de Córdoba, 13th of April 2021 (4 horas).

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

AWARDS

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

Guillermo Antonio Mena Marugán

- Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* as Review Editor in Cosmology.
- Member of the Editorial Board of the journal *Universe*.
- External Member for the Quality Committee of the Doctorate Program in Physics of the Universidad Complutense de Madrid.
- Chairperson of the “Quantum Aspects” session of the Spanish-Portuguese Relativity Meeting - EREP2021, 15th of September 2021.
- Member of the Organizing Committee of the ET-Spain Meeting, Madrid, 8th of October 2021.

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).

Gianluca Calcagni

- Field Chief Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*.
- Member of the LISA Membership Management Team.
- Member of the LISA Internal Networking Committee for Science.

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

María José García Borge

Investidura de Doctora Honoris Causa a María José García Borge por la universidad de Huelva

José A. Sánchez Gil

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

Vincenzo Giannini

- Specialty Chief Editor. *Frontiers in Plasmonics*

M^a Vega Cañamares Arribas

- Vicepresident of the Spectroscopy Comitee of the Spanish Optical Society (Spain)

Sagrario Martínez Ramírez

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

Santiago Sánchez Cortés

- Member of the Scientific Advisory Committee of the Journal of Raman Spectroscopy.

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 (ESCAPEIG)*.

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

- Member of the board of the *"Grupo Especializado de Física de Plasmas" of the Real Sociedad Española de Física (Spain)*.

Belén Maté Naya

- Member of the organizing commitee of the XXVII RNE-XI CIE, que se celebrará en Málaga, del 5-8 del 2022.

Carlos Álvarez Nicolás

- Second prize at *PhDayFísicas 2021* contest of the Universidad Complutense de Madrid, 4-8 october.

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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

Guillermo Antonio Mena Marugán

Series of online outreach seminars “Café con”.

Collaboration with the Real Sociedad Económica Extremeña de amigos del País in the organization of the following seminars in the series (and participation in the first two of them):

- Francisco Najarro de la Parra, CAB, INTA-CSIC, *El centro de la Vía Láctea: estrellas masivas, un agujero negro de Nobel y otros okupas* (<https://www.youtube.com/watch?v=PIXqccbtN5I>), 27th of January 2021.
- Markus Müller, Aachen University Germany, *Computación cuántica* (<https://www.youtube.com/watch?v=vJm2ZRTgX4c>), 17th of February 2021.
- María Rosa López Ramírez, Universidad de Málaga, *Espectroscopía Raman: origen, aplicaciones y retos* (https://www.youtube.com/watch?v=pss_Z9M5Poo), 17th of March 2021.
- Alessandro Feis, University of Florence, Italy, *The photoacoustic effect and its applications in biology* (<https://www.youtube.com/watch?v=j00dZE9P5MI>), 22nd of September 2021.

Online seminars, recorded and available at

<https://www.facebook.com/conoce.cafecon/>

<https://www.youtube.com/c/RealSociedadEconómicaAmigosdelPaísdeBadajoz/videos>

Jesús Fernando Barbero González

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.

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

Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

Madrid, 5th November 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.

Del cosmos al nano...y más allá.

Escape Room – Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

Madrid, 12th November 2021.

Gianluca Calcagni

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.

El universo para todos.

Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

Madrid, 5th November 2021.

Rafael Alejandro Molina Fernández

Entrevista en el programa de radio “Locuciencia” Radio Almenara.

Materiales cuánticos.

https://www.ivoox.com/materiales-cuanticos-230-audios-mp3_rf_77523437_1.html

Madrid, 30th October 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.

Historia de un transitor.

Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

Madrid, 4th November 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.

Escape Room “*Del cosmos al nano...y más allá*”.

Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

Madrid, 12th November 2021.

Historia de un transitor.

Charla de Navidad 2021 – Instituto de Estructura de la Materia-CSIC.

<https://www.youtube.com/watch?v=Zfs086t-TB8&t=3s>

Madrid, 20th December 2021.

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.
 Charla: “*Mujeres científicas: Una biografía y una encuesta*”.
 IES Cervantes, Madrid.
 2nd of February 2021.

La Noche de los Investigadores.
 Escape room “*Del Cosmos al nano... y más allá*”
 IEM-CSIC.
 24th of September 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.
 Conferencia online: “*Innovación de los materiales de construcción*”.
 5th of November 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.
 Escape room “*Del Cosmos al nano... y más allá*”.
 IEM-CSIC.
 12th of November 2021.

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.
 Taller “*¿De qué material me construiría una casa?*”.
 Colegio Villa de Griñón, Griñón, Madrid.
 11th of November 2021.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.
 Conferencia: “*Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo*”.
 Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
 4th of November 2021.

Guzmán Tejeda Gala y Vicente Timón Salinero

XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM.
Volamos (Taller de experimentos caseros en colegios e institutos).
 C. Nuestra Señora del Recuerdo, Fundación Santamarca, C. Liceo San Pablo, C. Stella Maris, C. Fec de Jesús,
 C. San Francisco Fundación Virgen de la Almudena y C. Esclavas de Cristo Rey.
 IES Adolfo Suárez, IES José Luis López Aranguren, IES Isabel la Católica.
 Between November 1st and 14th 2021.

Guzmán Tejeda Gala, Belén Maté Naya y Vicente Timón Salinero

Escape room “*Del Cosmos al nano... y más allá*”
 Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid
 Noche de los Investigadores - 24th of September 2021
 XXI Semana de la Ciencia y la Tecnología-CSIC-CAM – 15th of November 2021

Vicente Timón Salinero

“*LOCUCIENCIA*”.
 Programa de ciencia semanal en Radio Almenara 107.6 FM.
<http://www.radioalmenara.net/spip.php?rubrique117>
 During all 2021.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerre Sanz

Actor in “*Para siempre. Apuntes teloméricos variados*”.

Scientific theater – TeatrIEM.

- 25th of September 2021. Centro Cultural de Valdebernardo, Madrid, in the framework of Noche Europea de los Investigadores.
- 11th, 12th and 13th of November 2021. Museo Nacional de Ciencias Naturales, in the framework of Semana de la Ciencia.

Mari Cruz García Gutiérrez

Actress and assistant director in “*Para siempre. Apuntes teloméricos variados*”.

Scientific theater TeatrIEM.

- 25th of September 2021. Centro Cultural de Valdebernardo, Madrid, in the framework of Noche Europea de los Investigadores.
- 11th, 12th and 13th of November 2021. Museo Nacional de Ciencias Naturales, in the framework of Semana de la Ciencia.

- Writer of the short play with a scientific theme "Rapaces y jamones. Nuestra olimpiada particular" and writer of the dissemination article “Grandes instalaciones científicas: Sincrotrón”, published in the book “*La escena de Anaximandro. Encuentros de Teatro y Ciencia*” (Editorial CSIC and Punto de vista editores, 2021).

ISBN: 978-84-18322-56-3

- Organizer and moderator of the colloquium “*Encuentro de Teatro y Ciencia*”, 26th of April 2021 <https://www.youtube.com/watch?v=n2DuQGcSsTM>

Aurora Nogales Ruiz

Organizing committee of the activity Scape Room: “*Del cosmos al nano y más allá*”.

- 12th of November 2021, in the framework of Semana de la Ciencia.

Día Internacional de la “Mujer y la niña en la Ciencia” -11th of February.

Conference: “*Grandes mujeres científicas en la historia. Mujeres científicas de hoy: Mildred Dresselhaus*”.

- 18th of February 2021 - Universidad de Puerto Rico. ACS UPRA Chapter. Online evento.
- 9th of February 2021 – IES Palomeras, Madrid (Evento Online).

VI Festival de la Nanociencia y la Nanotecnología: ‘La Nanotecnología llega al Instituto. Nos vamos zoombando al nanomundo: Fabricando y observando nanoestructuras en el laboratorio’ IES María de Rodrigo. 7-June-2021

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: Safta Photonics Ltd.

Place: Videoconference

Date: During all the 2021 year, once a month

➤ MIEMBROS DE COMITÉS CIENTÍFICOS ASESORES

María José García Borge

- Coordinator of *Nuclear and Particle Physics* Subarea of the Spanish 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 Subatech (Nantes, France) International Scientific Council 2019-
- Member of the LNS, (Catania, Italy) Proposal advisory Committee 2020-
- Member of the program advisory Committee (PAC) for the Facility for Rare Isotopes Beam (East Lansing, USA) 2021.
- Chair of the *Program Advisory Committee for Nuclear Physics Experiments* at RIKEN (Tokio, Japan) RI Beam Factory (NP-PAC), 2019-2022.
- Scientific Adviser of the *Spanish Delegation at the CERN Council*, Dec. 2018 - Dec 2021.

Olof Tengblad

- Member of the *Scientific Comittee* of the Canfranc Laboratory LSC.
- Technical *Director of the R3B collaboration*, GSI / Fair.
- Member of the *ERNCIP TG Radiological and Nuclear Threats to Critical Infrastructure*, European Comission.

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

➤ **REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA**

Título de la reunión: PE characterization topics

Meeting attendees: J.F. Vega, S. Garrepally and O. Lhost

Collaboration: Total RC/R&D Polymers

Place: Virtual

Dates: 8th of March, 7th of July, 20th of October and 20th of December 2021

➤ **INFORMES DE TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA**

Juan Francisco Vega Borrrego

On the effect of long chain branching on rheological properties of polyethylenes.

Total SE

Dates: March, July and October 2021

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. Tejeda, 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^a 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:

Ricardo Fernández Perea

- Co-Leader of the Task Group 1: Development of First-Principles Force Fields for Molecular Dynamics and Quantum-Monte-Carlo Simulation of the COST Action CM1405: Molecules in motion (MOLIM) of the European Union.

Carlos Cabrillo García

- Miembro de tribunal en el Trabajo de Investigación de Bachillerato de Excelencia Teoría de Juegos: un modelo dinámico de contiendas que explica la extinción del Homo Neanderthalensis, ES Gerardo Diego de Pozuelo de Alarcón, 26/10/2021

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 Moleres.

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 Tejeda 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:

Mari Cruz García Gutiérrez and Tiberio A. Ezquerra

- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 3rd-5th June 2021
- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 29th November-2nd December 2021

Aurora Nogales Ruiz

- Measurements in ALBA Syncrhotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 29th November-2nd December 2021

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. D.R. Alcoba, O.B. Oña, L. Lain, A. Torre, P. Capuzzi, G.E. Massaccesi, E. Ríos, A. Rubio-García, and J. Dukelsky.
Variational Determination of Ground and Excited-State Two-Electron Reduced Density Matrices in the Doubly Occupied Configuration Space: A Dispersion Operator Approach.
Journal of Chemical Physics **154**, 224104 (2021).
2. A. Algora, E. Ganioglu, P. Sarriguren, V. Guadilla, L.M. Fraile, E. Nácher, B. Rubio, J.L. Tain, J. Agramunt, W. Gelletly, J.A. Briz, R.B. Cakirli, M. Fallot, D. Jordán, Z. Halász, I. Kuti, A. Montaner, A. Onillon, S.E.A. Orrigo, A. Perez Cerdan, S. Rice, V. Vedia, and E. Valencia.
Total Absorption Gamma-Ray Spectroscopy Study of the β -Decay of ^{186}Hg .
Physics Letters B **819**, 136438 (2021).
3. A. Alonso-Serrano, E. Tjoa, L.J. Garay, and E. Martín-Martínez.
The Time Traveler's Guide to the Quantization of Zero Modes.
Journal of High Energy Physics **12** (2021) 170.
4. Á. Álvarez-Domínguez, L.J. Garay, D. García-Heredia, and M. Martín-Benito.
Quantum Unitary Dynamics of a Charged Fermionic Field and Schwinger Effect.
Journal of High Energy Physics **10** (2021) 074.
5. J. Arrechea, C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Semiclassical Constant-Density Spheres in a Regularized Polyakov Approximation.
Physical Review D **104**, 065004 (2021).
6. J. Arrechea, C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Reissner–Nordström Geometry Counterpart in Semiclassical Gravity.
Classical and Quantum Gravity **38**, 115014 (2021).
7. J. Arrechea, C. Barceló, L.J. Garay, and G. García-Moreno.
Inversion of Statistics and Thermalization in the Unruh Effect.
Physical Review D **104**, 065004 (2021).
8. J. Arrechea, C. Barceló, V. Boyanov, and L.J. Garay.
Vacuum Semiclassical Gravity Does Not Leave Space for Safe Singularities.
Universe **7** (2021) 281.
9. Y. Baba, F. Domínguez-Adame, G. Platero, and R.A. Molina.
Rashba Coupling and Spin Switching through Surface States of Dirac Semimetals.
New Journal of Physics **23**, 023008 (2021).
10. V.V. Baran and J. Dukelsky.
Variational Theory Combining Number-Projected BCS and Coupled-Cluster Doubles.
Physical Review C **103**, 054317 (2021).
11. J.F. Barbero G., B. Díaz, J. Margalef-Bentabol, and E.J.S. Villaseñor.
Concise Symplectic Formulation for Tetrad Gravity.
Physical Review D **103**, 024051 (2021).
12. J. F. Barbero G., B. Díaz, J. Margalef-Bentabol, and E.J.S. Villaseñor.
Hamiltonian Gotay-Nester-Hinds Analysis of the Parametrized Unimodular Extension of the Holst Action.
Physical Review D **103**, 064062 (2021).
13. J. F. Barbero G., J. Margalef-Bentabol, V. Varo, and E.J.S. Villaseñor.
Covariant Phase space for Gravity with Boundaries: Metric vs Tetrad Formulations.
Physical Review D **104**, 044048 (2021).

14. J.F. Barbero G., J. Margalef-Bentabol, V. Varo, and E.J.S. Villaseñor.
Palatini Gravity with Nonmetricity, Torsion, and Boundaries in Metric and Connection Variables.
Physical Review D **104**, 044046 (2021).
15. J. F. Barbero G., M. Basquens, V. Varo, and E.J.S. Villaseñor.
Three Roads to the Geometric Constraint Formulation of Gravitational Theories with Boundaries.
Symmetry **13**, 1430 (2021).
16. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L.J. Garay, and G. García-Moreno.
Toward a Mechanism for the Emergence of Gravity.
Applied Sciences **1**, 8763J (2021).
17. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L.J. Garay, and G. García-Moreno.
Emergent Gauge Symmetries: Yang-Mills Theory.
Physical Review D **104**, 025017 (2021).
18. C. Barceló; V. Boyanov, R. Carballo-Rubio and L.J. Garay.
Black Hole Inner Horizon Evaporation in Semiclassical Gravity.
Classical and Quantum Gravity **38**, 125003 (2021).
19. C. Barceló, L.J. Garay, and J. Redondo-Yuste.
Interpretations and Naturalness in the Radiation-Reaction Problem.
Symmetry **13**, 658 (2021).
20. G. Calcagni.
Quantum Scalar Field Theories with Fractional Operators.
Classical and Quantum Gravity **38**, 165006 (2021).
21. G. Calcagni.
Classical and Quantum Gravity with Fractional Operators.
Classical and Quantum Gravity **38**, 165005 (2021); 169601 (2021) (erratum).
22. G. Calcagni.
Multifractional Theories: An Updated Review.
Modern Physics Letters A **36**, 2140006 (2021).
23. Calcagni, G.; Harris, J.A.; Pellón, R.
Beyond Rescorla–Wagner: the Ups and Downs of Learning
Computational Brain and Behavior
24. G. Calcagni and S. Kuroyanagi.
Stochastic Gravitational-Wave Background in Quantum Gravity.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **03** (2021) 019.
25. I. Casal, L. Muñoz, R.A. Molina.
Accuracy and Precision of the Estimation of the Number of Missing Levels in Chaotic Spectra Using Long-Range Correlations.
European Physical Journal Plus **136**, 263 (2021).
26. A.L. Corps, R.A. Molina, and A. Relaño.
Signatures of a Critical Point in the Many-Body Localization Transition.
SciPost Physics **10**, 107 (2021).
27. J. Cortez, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
A Brief Overview of Results about Uniqueness of the Quantization in Cosmology.
Universe **07** (2021) 299.
28. S. Dalbouha, M. Mogren Al-Mogren, and M.L. Senent.
Rotational and Torsional Properties of Various Monosubstituted Isotopologues of Acetone ($CH_3-CO-CH_3$) from Explicitly Correlated Ab Initio Methods.
ACS Earth & Space Chemistry **5**, 890 (2021).

29. A. C. Dombos, A. Spyrou, F. Naqvi, S.J. Quinn, S.N. Liddick, A. Algora, T. Baumann, J. Brett, B.P. Crider, P.A. De Young, T. Ginter, J. Gombas, S. Lyons, T. Marketin, P. Moller, W.-J. Ong, A. Palmisano, J. Pereira, C.J. Prokop, P. Sarriguren, D.P. Scriven, A. Simon, M.K. Smith, and S. Valenta.
Total Absorption Spectroscopy of the Beta Decay of 101,102Zr and 109Tc.
Physical Review C **103**, 025810 (2021).
30. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, and S. Prado.
Non- Oscillating Power Spectra in Loop Quantum Cosmology.
Classical and Quantum Gravity **38**, 035001 (2021).
31. B. Elizaga Navascués and G.A. Mena Marugán.
Hybrid Loop Quantum Cosmology: An Overview.
Frontiers in Astronomy and Space Sciences **8**, 624824 (2021).
32. B. Elizaga Navascués and G.A. Mena Marugán.
Analytical Investigation of Pre-Inflationary Effects in the Primordial Power Spectrum: From General Relativity to Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **09** (2021) 030.
33. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, and S. Prado.
Non-Oscillating Vacuum States and the Quantum Homogeneity and Isotropy Hypothesis in Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **104**, 083541 (2021).
34. B. Elizaga Navascués, R. Jiménez-Llamas and G.A. Mena Marugán.
Primordial Perturbations in Kinetically Dominated Regimes of General Relativity and Hybrid Quantum Cosmology.
Physical Review D **104**, 103520 (2021).
35. M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, A.N. Antonov, I.C. Danchev, P. Sarriguren, and D.N. Kadrev.
Nuclear Symmetry Energy Components and Their Ratio: A New Approach within the Coherent Density Fluctuation Model.
Physical Review C **104**, 044312 (2021).
36. V. Gámez and M.L. Senent.
The Formation of $C_3O_3H_6$ Structural Isomers in the Gas Phase through Barrierless Pathways. Formation and Spectroscopic Characterization of Methoxy Acetic Acid.
Astrophysical Journal **913**, 21 (2021).
37. A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.
Exploring Alternatives to the Hamiltonian Calculation of the Ashtekar-Olmedo-Singh Black Hole Solution.
Frontiers in Astronomy and Space Sciences **8**, 701723 (2021).
38. E. Garrido and A.S. Jensen.
Direct and Sequential Four-Body Recombination Rates at Low Temperatures.
Physical Review C **103**, 055813 (2021).
39. E. Garrido and A.S. Jensen.
Efimov Effect in Non-Integer Dimensions Induced by an External Field.
Physics Letters A **385**, 126982 (2021).
40. E. Garrido and A.S. Jensen.
Efimov Effect Evaporation After Confinement.
Few-body Systems **62**, 25 (2021).
41. J. González and T. Staubert.
Magnetic Phases from Competing Hubbard and Extended Coulomb Interactions in Twisted Bilayer Graphene.
Physical Review B **104**, 115110 (2021).
42. B. Hernández, P. Sarriguren, O. Moreno, E. Moya de Guerra, D.N. Kadrev, and A.N. Antonov.
Nuclear Shape Transitions and Elastic Magnetic Electron Scattering.
Physical Review C **103**, 014303 (2021).

43. W.J. Holdhusen, S. Lerma-Hernández, J. Dukelsky, and G. Ortiz.
Integrable Model of SO(5) Superfluidity.
Phys. Rev. B **104**, L060503 (2021).
44. G.E. Massaccesi, A. Rubio-García, P. Capuzzi, E. Ríos, O.B. Oña, J. Dukelsky, L. Lain, A. Torre, and D.R. Alcoba.
Variational Determination of the Two-Particle Reduced Density Matrix within the Doubly Occupied Configuration Interaction Space: Exploiting Translational and Reflection Invariance.
Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2021**, 013110 (2021).
45. L. Modesto and G. Calcagni.
Tree-Level Scattering Amplitudes in Nonlocal Field Theories.
Journal of High Energy Physics **10** (2021) 169.
46. M. Mogren Al-Mogren, and M.L. Senent.
Ab Initio Study of the Large Amplitude Motions of Various Monosubstituted Isotopologues of Methyl Amine (CH₃-NH₂).
Frontiers in Chemistry **9**, 751203 (2021).
47. P. Sarriuguren.
Self-Consistent Calculations of Electron-Capture Decays in Z=118, 119, and 120 Superheavy Isotopes.
Physics Letters B **815**, 136149 (2021).
48. P. Schuck, D. S. Delion, J. Dukelsky, M. Jemai, E. Litvinova, G. Ropke, and M. Tohyama.
Equation of Motion Method for strongly correlated Fermi systems and Extended RPA approaches.
Physics Reports **929**, 1 (2021).
49. M.L. Senent and S. Dalbouha.
Large Amplitude Motions of Pyruvic Acid (CH₃-CO-COOH).
Molecules **26**, 4269 (2021).
50. J.T. Zhang, X.L. Tu, P. Sarriuguren, K. Yue, Q. Zeng, Z.Y. Sun, M. Wang, Y.H. Zhang, X.H. Zhou, and Yu. A. Litvinov.
Systematic Trends of Neutron Skin Thickness versus Relative Neutron Excess.
Physical Review C **104**, 034303 (2021).

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

51. Andel, B.; Van Duppen, P.; Andreyev, A. N.; Blazhev, A.; Grawe, H.; Lica, R.; Naidja, H.; Stryjczyk, M.; Algora,A.; Antalic, S.; Barzakh, A.; Benito, J.; Benzoni, G.; Berry, T.; Borge, M. J. G.; Chrysalidis, K.; Clisu, C.; Costache,C.; Cubiss, J. G.; De Witte, H.; Fedorov, D., V; Fedosseev, V. N.; Fraile, L. M.; Fynbo, H. O. U.; Greenlees, P.T.; Harkness-Brennan, L. J.; Huyse, M.; Illana, A.; Jolie, J.; Judson, D. S.; Konki, J.; Lazarus, I; Madurga, M.;Marginean, N.; Marginean, R.; Mihai, C.; Marsh, B. A.; Molkanov, P.; Mosat, P.; Murias, J. R.; Nacher, E.; Negret,A.; Page, R. D.; Pascu, S.; Perea, A.; Pucknell, V; Rahkila, P.; Rapisarda, E.; Rezynkina, K.; Sanchez-Tembleque,V; Schomacker, K.; Seliverstov, M. D.; Sotty, C.; Stan, L.; Surder, C.; Tengblad, O.; Vedia, V.; Vinals, S.;Wadsworth, R.; Warr, N.; IDS Collaboration.
New beta-decaying state in Bi-214.
Physical Review C **104**, 5 (2021).
52. MacGregor, P. T.; Sharp, D. K.; Freeman, S. J.; Hoffman, C. R.; Kay, B. P.; Tang, T. L.; Gaffney, L. P.; Baader, E. F.; Borge, M. J. G.; Butler, P. A.; Catford, W. N.; Cropper, B. D.; de Angelis, G.; Konki, J.; Kroell, Th; Labiche, M.; Lazarus, I. H.; Lubna, R. S.; Martel, I; McNeil, D. G.; Page, R. D.; Poleshchuk, O.; Raabe, R.; Recchia, F.; Yang, J
Evolution of single-particle structure near the N=20 island of inversion.
Physical Review C **104**, 5 (2021).
53. Piersa-Silkowska, M.; Korgul, A.; Benito, J.; Fraile, L. M.; Adamska, E.; Andreyev, A. N.; Alvarez-Rodriguez, R.; Barzakh, A. E.; Benzoni, G.; Berry, T.; Borge, M. J. G.; Carmona, M.; Chrysalidis, K.; Correia, J. G.; Costache, C.; Cubiss, J. G.; Goodacre, T. Day; De Witte, H.; Fedorov, D., V; Fedosseev, V. N.; Fernandez-Martinez, G.; Fijalkowska, A.; Fynbo, H.; Galaviz, D.; Galve, P.; Garcia-Diez, M.; Greenlees, P. T.; Grzywacz,

R.; Harkness-Brennan, L. J.; Henrich, C.; Huyse, M.; Ibanez, P.; Illana, A.; Janas, Z.; Johnston, K.; Jolie, J.; Judson, D. S.; Karanyonchev, V; Kicinska-Habior, M.; Konki, J.; Koszuk, L.; Kurcewicz, J.; Lazarus, I.; Lica, R.; Lopez-Montes, A.; Mach, H.; Madurga, M.; Marroquin, I.; Marsh, B.; Martinez, M. C.; Mazzocchi, C.; Miernik, K.; Mihai, C.; Marginean, N.; Marginean, R.; Negret, A.; Nacher, E.; Ojala, J.; Olaizola, B.; Page, R. D.; Pakarinen, J.; Pascu, S.; Paulauskas, S., V; Perea, A.; Pucknell, V; Rahkila, P.; Raison, C.; Rapisarda, E.; Rezynkina, K.; Rotaru, F.; Rothe, S.; Rykaczewski, K. P.; Regis, J-M; Schomacker, K.; Silkowski, M.; Simpson, G.; Soty, C.; Stan, L.; Stanoiu, M.; Stryjczyk, M.; Sanchez-Parcerisa, D.; Sanchez-Tembleque, V; Tengblad, O.; Turturica, A.; Udias, J. M.; Van Duppen, P.; Vedia, V.; Villa, A.; Vinals, S.; Wadsworth, R.; Walters, W. B.; Warr, N.; Wilkins, S. G.; IDS Collaboration.

First beta-decay spectroscopy of In-135 and new beta-decay branches of In-134

Physical Review C **104**, 4 (2021).

54. Kuhn, K.; Sarazin, F.; Nunes, F. M.; Alvarez, M. A. G.; Andreoiu, C.; Bardayan, D. W.; Bender, P. C.; Blackmon, J. C.; Borge, M. J. G.; Braid, R.; Brown, B. A.; Catford, W. N.; Diget, C. Aa; DiPietro, A.; Drake, T. E.; Figuera, P.; Garnsworthy, A. B.; Gomez-Camacho, J.; Hackman, G.; Hager, U.; Ilyushkin, S., V; Nacher, E.; O'Malley, P. D.; Perea, A.; Pesudo, V; Pittman, S. T.; Smalley, D.; Svensson, C. E.; Tengblad, O.; Thompson, P.; Unsworth, C.; Wang.

Experimental study of the nature of the 1(-) and 2(-) excited excited states in Be-10 using the Be-11(p,d) reaction in inverse kinematics.

Physical Review C **104**, 4 (2021).

55. Sparta, R.; Di Pietro, A.; Figuera, P.; Tengblad, O.; Moro, A. M.; Martel, I.; Fernandez-Garcia, J. P.; Lei, Jin; Acosta, L.; Borge, M. J. G.; Bruni, G.; Cederkall, J.; Davinson, T.; Ovejas, J. D.; Fraile, L. M.; Galaviz, D.; Jensen, J. Halkjaer; Jonson, B.; La Cognata, M.; Perea, A.; Sanchez-Benitez, A. M.; Soic, N.; Vinals.

Probing proton halo effects in the B-8+Zn-64 collision around the Coulomb barrier.

Physics Letters B **820**, 136477 (2021).

56. Sekal, S.; Fraile, L. M.; Lica, R.; Borge, M. J. G.; Walters, W. B.; Aprahamian, A.; Benchouk, C.; Bernards, C.; Briz, J. A.; Bucher, B.; Chiara, C. J.; Dlouhy, Z.; Gheorghe, I.; Ghita, D. G.; Hoff, P.; Jolie, J.; Koster, U.; Kurcewicz, W.; Mach, H.; Marginean, N.; Marginean, R.; Meliani, Z.; Olaizola, B.; Paziy, V; Regis, J. M.; Rudigier, M.; Sava, T.; Simpson, G. S.; Stanoiu, M.; Stroe, L.

Low-spin states in Ge-80 populated in the beta decay of the Ga-80 3(-)isomer.

Physical Review C **104**, 2 (2021).

57. Knyazev, A.; Park, J.; Golubev, P.; Cederkall, J.; Alvarez-Pol, H.; Benlliure, J.; Cabanelas, P.; Casarejos, E.; Causeret, L.; Cortina-Gil, D.; Fernandez, P. Diaz; Feijoo, M.; Galaviz, D.; Galiana, E.; Gernhaeuser, R.; Gonzalez, D.; Hartig, A. -L.; Heinz, A.; Heiss, B.; Johansson, H. T.; Klenze, P.; Kroell, T.; Perea, A.; Ponnath, L.; Ren, Z.; Rhee, H. -B.; Rodriguez-Sanchez, J. L.; Rondeau, G.; Tengblad, O.; Scheblykin, I. G.; Teubig, P.; Timm, R

Simulations of light collection in long tapered CsI(Tl) scintillators using real crystal surface data and comparisons to measurement.

Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A **1003**, 165302 (2021).

58. Brunet, M.; Podolyak, Zs; Berry, T. A.; Brown, B. A.; Carroll, R. J.; Lica, R.; Soty, Ch; Andreyev, A. N.; Borge, M. J. G.; Cubiss, J. G.; Fraile, L. M.; Fynbo, H. O. U.; Gamba, E.; Greenlees, P.; Harkness-Brennan, L. J.; Huyse, M.; Judson, D. S.; Konki, J.; Kurcewicz, J.; Lazarus, I.; Madurga, M.; Marginean, N.; Marginean, R.; Marroquin, I.; Mihai, C.; Nacher, E.; Negret, A.; Pascu, S.; Page, R. D.; Perea, A.; Phrompao, J.; Piersa, M.; Pucknell, V; Rahkila, P.; Rapisarda, E.; Regan, P. H.; Rotaru, F.; Rudigier, M.; Shand, C. M.; Shearman, R.; Simpson, E. C.; Stora, T.; Tengblad, O.; Van Duppen, P.; Vedia, V.; Vinals, S.; Wadsworth, R.; Warr, N.; De Witte, H.

Competition between allowed and first-forbidden beta decays of At-208 and expansion of the Po-208 level scheme.

Physical Review C **103**, 5 (2021).

59. Redondo-Cubero, A.; Borge, M. J. G.; Gordillo, N.; Gutierrez, P. C.; Olivares, J.; Casero, R. Perez; Ynsa, M.D.

Current status and future developments of the ion beam facility at the centre of micro-analysis of materials in Madrid.

European Physical Journal Plus **136**(2) 175 (2021).

60. Vinals, S.; Nacher, E.; Tengblad, O.; Borge, M. J. G.; Briz, J. A.; Gad, A.; Munch, M.; Perea, A.

Calibration and response function of a compact silicon-detector set-up for charged-particle spectroscopy using GEANT4.

European Physical Journal A **57**(2) 49 (2021).

61. Blank, B.; Adimi, N.; Alcorta, M.; Bey, A.; Borge, M. J. G.; Brown, B. A.; de Oliveira Santos, F.; Dossat, C.; Fynbo, H. O. U.; Giovinazzo, J.; Knudsen, H. H.; Madurga, M.; Magilligan, A.; Matea, I.; Perea, A.; Suemmerer, K.; Tengblad, O.; Thomas, J. C.
Detailed study of the decay of Ar-32.
 European Physical Journal A **57**(1) 28 (2021).
62. Watanabe, H.; Yuan, C. X.; Lorusso, G.; Nishimura, S.; Xu, Z. Y.; Sumikama, T.; Soderstrom, P-A; Doornenbal, P.; Browne, F.; Gey, G.; Jung, H. S.; Taprogge, J.; Vajta, Zs; Wang, H. K.; Wu, J.; Yagi, A.; Baba, H.; Benzoni, G.; Chae, K. Y.; Crespi, F. C. L.; Fukuda, N.; Gernhauser, R.; Inabe, N.; Isobe, T.; Jungclaus, A.; Kameda, D.; Kim, G. D.; Kim, Y. K.; Kojouharov, I.; Kondev, F. G.; Kubo, T.; Kurz, N.; Kwon, Y. K.; Lane, G. J.; Li, Z.; Moon, C-B; Montaner-Piza, A.; Moschner, K.; Naqvi, F.; Niikura, M.; Nishibata, H.; Nishimura, D.; Odahara, A.; Orlandi, R.; Patel, Z.; Podolyak, Zs; Sakurai, H.; Schaffner, H.; Simpson, G. S.; Steiger, K.; Suzuki, H.; Takeda, H.; Wendt, A.; Yoshinaga, K.
Impact of shell evolution on Gamow-Teller beta decay from a high-spin long-lived isomer in Ag-127.
 Physics Letters B **823** 136766 (2021).
63. Fernandez, A.; Jungclaus, A.; Golubev, P.; Rudolph, D.; Sarmiento, L. G.; Gargano, A.; Naidja, H.; Astier, A.; Dupont, E.; Gadea, A.; Nacher, E.; Perea, A.; Wimmer, K.; Clement, E.; Fremont, G.; Goupil, J.; Houarner, C.; Jacquot, B.; Korichi, A.; Lemasson, A.; Li, H. J.; Ljungvall, J.; Menager, L.; Perez-Vidal, R. M.; Petrache, C. M.; Ralet, D.; Ropert, J. A.; Saillant, F.; Samark-Roth, A.; Simpson, G. S.; Spitaels, C.; Zielinska, M.; Ansari, S.; Dudouet, J.; Illana, A.; Jurado, M.; Kocheva, D.; Lorenz, Ch; Quintana, B.; Rainovski, G.; Redon, N.; Tocabens, G.; Barrientos, D.; Benzoni, G.; Birkenbach, B.; Boston, A. J.; Boston, H. C.; Bracco, A.; Ciemala, M.; Collado, J.; Cullen, D. M.; Domingo-Pardo, C.; Eberth, J.; Gonzalez, V; Harkness-Brennan, L. J.; Hess, H.; Judson, D. S.; Korten, W.; Leoni, S.; Maj, A.; Menegazzo, R.; Mengoni, D.; Michelagnoli, C.; Million, B.; Napoli, D. R.; Nyberg, J.; Podolyak, Zs; Pullia, A.; Reiter, P.; Sanchis, E.; Stezowski, O.; Theisen, Ch; Valiente-Dobon, J. J.
Reinterpretation of excited states in Po-212: Shell-model multiplets rather than alpha-cluster states.
 Physical Review C **104**, 5 (2021).
64. Liu, X.; Cederwall, B.; Qi, C.; Wyss, R. A.; Aktas, O.; Ertoprak, A.; Zhang, W.; Clement, E.; de France, G.; Ralet, D.; Gadea, A.; Goasduff, A.; Jaworski, G.; Kuti, I.; Nyako, B. M.; Nyberg, J.; Palacz, M.; Wadsworth, R.; Valiente-Dobon, J. J.; Al-Azri, H.; Nyberg, A. Atac; Back, T.; de Angelis, G.; Doncel, M.; Dudouet, J.; Gottardo, A.; Jurado, M.; Ljungvall, J.; Mengoni, D.; Napoli, D. R.; Petrache, C. M.; Sohler, D.; Timar, J.; Barrientos, D.; Bednarczyk, P.; Benzoni, G.; Birkenbach, B.; Boston, A. J.; Boston, H. C.; Burrows, I.; Charles, L.; Ciemala, M.; Crespi, F. C. L.; Cullen, D. M.; Desesquelles, P.; Domingo-Pardo, C.; Eberth, J.; Erduran, N.; Erturk, S.; Gonzalez, V; Goupil, J.; Hess, H.; Huyuk, T.; Jungclaus, A.; Korten, W.; Lemasson, A.; Leoni, S.; Maj, A.; Menegazzo, R.; Million, B.; Perez-Vidal, R. M.; Podolyak, Zs; Pullia, A.; Recchia, F.; Reiter, P.; Saillant, F.; Salsac, M. D.; Sanchis, E.; Simpson, J.; Stezowski, O.; Theisen, C.; Zielinska, M.
Evidence for enhanced neutron-proton correlations from the level structure of the $N = Z+1$ nucleus Tc-87(43)44.
 Physical Review C **104**, 2 (2021).
65. Luis Egido, J.; Jungclaus, Andrea.
Low-Energy Nuclear Excitations along the alpha-Decay Chains of Superheavy (292)Lv and (294)Og.
 Physical Review Letters **126**, 19 (2021).
66. Moon, B.; Jungclaus, A.; Naidja, H.; Gargano, A.; Lozeva, R.; Moon, C-B; Odahara, A.; Simpson, G. S.; Nishimura, S.; Browne, F.; Doornenbal, P.; Gey, G.; Keatings, J.; Lorusso, G.; Patel, Z.; Rice, S.; Si, M.; Sinclair, L.; Soderstrom, P-A; Sumikama, T.; Taprogge, J.; Watanabe, H.; Wu, J.; Xu, Z. Y.; Yagi, A.; Ahn, D. S.; Baba, H.; Garrote, F. L. Bello; Boenig, S.; Daido, R.; Daugas, J. M.; Didierjean, F.; Drouet, F.; Fang, Y.; Fukuda, N.; Gernhaeuser, R.; Hong, B.; Ideguchi, E.; Ilieva, S.; Inabe, N.; Ishigaki, T.; Isobe, T.; Jung, H. S.; Kameda, D.; Kojouharov, I.; Komatsubara, T.; Kroell, T.; Kubo, T.; Kurz, N.; Kwon, Y. K.; Lee, C. S.; Lee, P.; Li, Z.; Montaner-Piza, A.; Morimoto, S.; Moschner, K.; Muecher, D.; Murai, D.; Niikura, M.; Nishibata, H.; Nishizuka, I.; Orlandi, R.; Sakurai, H.; Schaffner, H.; Shimizu, Y.; Steiger, K.; Suzuki, H.; Takeda, H.; Tshoo, K.; Vajta, Zs; Wendt, A.; Yokoyama, R.; Yoshinaga, K.
Nuclear structure of Te isotopes beyond neutron magic number N=82.
 Physical Review C **103**, 3 (2021).
67. T. R. Saito, W. Dou, V. Drozd, H. Ekawa, S. Escrig, Y. He, N. Kalantar-Nayestanaki, A. Kasagi, M. Kavatsyuk, E. Liu, Y. Ma, S. Minami, A. Muneem, M. Nakagawa, K. Nakazawa, C. Rappold, N. Saito, C. Scheidenberger, M. Taki, Y. K. Tanaka, J. Yoshida, M. Yoshimoto, H. Wang, X. Zhou.
New directions in hypernuclear physics.
 Nature Reviews Physics **3**, 12, 803-813 (2021).

68. S. Escrig, A. I. Morales, S. Nishimura, M. Niikura, A. Poves, Z. Y. Xu, G. Lorusso, F. Browne, P. Doornenbal, G. Gey, H. S. Jung, Z. Li, P. A. Soderstrom, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, H. Baba, S. Franchoo, T. Isobe, P. R. John, I. Kojouharov, S. Kubono, N. Kurz, I. Matea, K. Matsui, D. Mengoni, P. Morfouace, D. R. Napoli, F. Naqvi, H. Nishibata, A. Odahara, E. Sahin, H. Sakurai, H. Schaffner, I. G. Stefan, D. Suzuki, R. Taniuchi, V. Werner, D. Sohler.
Persistence of the Z=28 shell gap in A=75 isobars: Identification of a possible (1/2-) μ s isomer in ^{75}Co and β decay to ^{75}Ni .
 Physical Review C **103**, 064328 (2021).
69. A. Fernández, A.Jungclaus, P.Doornenbal, M.A.Bentle, S.M.Lenz,i D.Rudolph, F.Browne, M.L.Cortés, T.Koiwaig, R.Taniuch, V.Vaquero, K.Wimmer,g T.Aric,i N.Imai, N.Kitamura, B.Longfellow, R.Lozeva, B.Maus, D.R.Napoli, M.Niikura, X.Pereira-Lope, S.Pigliapoco, A.Pove, F.Recchiad, P.Ruotsalainen, H.Sakurai, S.Uthayakumaa, R.Wadsworth, R.Yajzey.
Mirror energy differences above the 0f7/2 shell: First γ -ray spectroscopy of the $T_z = -2$ nucleus ^{56}Zn .
 Physics Letters B **823**, 136784 (2021).
70. C. Cabrillo, R. Fernandez-Perea, F. Javier Bermejo, L. Chico, C. Mondelli, M. A. Gonzalez, E. Enciso, A. M. Benito, and W. K. Maser.
Formation of one-dimensional quantum crystals of molecular deuterium inside carbon nanotubes.
 Carbon **175**, p.141–154 (2021).
71. R. Boffy, L. Martel, R. Schweins, J. Somers, J. Beaucour, F.J. Bermejo.
A NMR and SANS study of alkali-borosilicate behaviour under thermal neutron irradiation.
 $\text{Journal of Nuclear Materials}$ **544**, 152699 (2021).
72. D. R. Abujetas, A. Barreda, F. Moreno, A. Litman, J.-M. Geffrin, and J. A. Sánchez-Gil.
High-Q Transparency Band in All-Dielectric Metasurfaces Induced by a Quasi Bound State in the Continuum.
 $\text{Laser \& Photonics Reviews}$ **15**, 2000263 (2021).
73. D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.
Near-Field Excitation of Bound States in the Continuum in All-Dielectric Metasurfaces through a Coupled Electric/Magnetic Dipole Model.
 Nanomaterials **11**, 998 (2021).
74. D. R. Abujetas, M. Marqués and J. A. Sánchez-Gil.
Modulated flipping torque, spin-induced radiation pressure, and chiral sorting exerted by guided light.
 Optics Express **15**, 16969–16979 (2021).
75. D. R. Abujetas, N. de Sousa, A. García-Martín, J. M. Llorens, and J. A. Sánchez-Gil.
Active angular tuning and switching of Brewster quasi bound states in the continuum in magneto-optic metasurfaces.
 Nanophotonics **10**, 4223–4232 (2021).
76. N. J. J. van Hoof, D. R. Abujetas, S. E. T. ter Huurne, F. Verdelli, G. C. A. Timmermans, J. A. Sánchez-Gil, and J. Gómez Rivas.
Unveiling Symmetry Protection of Bound States in the Continuum with Terahertz Near field Imaging.
 ACS Photonics **8**, 3010–3016 (2021).
77. Marie S. Rider and Vincenzo Giannini.
Proposal for THz lasing from a topological quantum dot.
 Nanophotonics **10**, 3497 (2021).
78. Samuel J Palmer and Vincenzo Giannini.
Berry bands and pseudo-spin of topological photonic phases Electric/Magnetic Dipole Model.
 $\text{Physical Review Research}$ **3**, L022013 (2021).
79. Luca Guerrini, Eduardo Garcia-Rico, Ana O'Loghlen, Vincenzo Giannini and Ramon A. Alvarez-Puebla.
Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Spectroscopy for Sensing and Characterization of Exosomes in Cancer Diagnosis.
 Cancers **13**, 2179 (2021).

80. Alya Alhammadi, Jin-You Lu, Mahra Almheiri, Fatima Alzaabi, Zineb Matouk, Mohamed Al Teneiji, Rashid K. Abu-Rub, Vincenzo Giannini, and Dong-Wook Lee.
Numerical Modelling and Optimization of Two-Dimensional Phononic Band Gaps in Elastic Metamaterials with Square Inclusions.
Applied Sciences **11**, 3124 (2021).
81. Xiaofei Xiao, Stefan A. Maier, and Vincenzo Giannini.
Ultrabroad-Band Direct Digital Refractive Index Imaging Based on Suspended Graphene Plasmon Nanocavities.
ACS Appl. Nano Mater. **4**, 1635–1642, (2021).
82. Giulia Vannucci, Maria Vega Cañamares, Silvia Prati, Santiago Sanchez-Cortes.
Analysis of the tautomeric equilibrium of two red monoazo dyes by UV-Visible, Raman and SERS spectroscopies.
Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, **261**, 120007 (2021).
83. Giulia Zanasi, Rafael J.G. Rubira, Ornella Francioso, Maria Vega Cañamares, Carlos J.L. Constantino, Santiago Sanchez-Cortes.
Sensing atrazine herbicide degradation products through their interactions with humic substances by surface-enhanced Raman scattering
Chemosensors, **9**, 148 (2021).
84. X. Wu, S. Sanchez-Cortes, I. Kakoulli.
Carminic Acid Based Red Dye from Scale Insects Detected in Red Ruby-Crowned Kinglet Feathers by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Chempluschem 86, 1074 (2021).
85. R.J.G. Rubira, L.N. Furini, C.J.L. Constantino, S. Sanchez-Cortes,
SERS detection of prometryn herbicide based on its optimized adsorption on Ag nanoparticles.
Vibrational Spectroscopy **114**, 103245(2021).
86. Roschi, E.; Gellini, C.; Ricci, M.; Sanchez-Cortes, S.; Focardi, C.; Neri, B.; Otero, J.C.; Lopez-Tocon, I.; Smulevich, G.; Becucci, M.
Surface-Enhanced Raman Spectroscopy for Bisphenols Detection: Toward a Better Understanding of the Analyte-Nanosystem Interactions.
Nanomaterials, **11**, 881(2021).
87. R. Sanchez-Gonzalez, E. Imbarack, C. Suazo, J.P. Soto, P. Leyton, S. Sanchez-Cortes, M. Campos-Vallette
Synthesis, characterization and surface enhanced Raman spectroscopy study of a new family of different substituted cruciform molecular systems deposited on gold nanoparticles.
Journal of Raman Spectroscopy **52**, 959 (2021).
88. Di Foggia, M.; Tognoli, V.; Ottani, S.; Dettin, M.; Zamuner, A.; Sanchez-Cortes, S.; Cesini, D.; Torreggiani, A.
SERS Investigation on Oligopeptides Used as Biomimetic Coatings for Medical Devices.
Biomolecules **11**, 959 (2021).
89. Garcia-Leis, A.; Sanchez-Cortes, S.
Label-Free Detection and Self-Aggregation of Amyloid beta-Peptides Based on Plasmonic Effects Induced by Ag Nanoparticles: Implications in Alzheimer's Disease Diagnosis.
ACS Applied Nano Materials **4**, 3565 (2021).
90. N. Devos, D. Reyman, S. Sanchez-Cortes.
Chocolate composition and its crystallization process: A multidisciplinary analysis.
Food Chemistry **342**, 128301 (2021).
91. F. Celis, C. Segura, J.S. Gomez-Jeria, M. Campos-Vallette, S. Sanchez-Cortes.
Analysis of biomolecules in cochineal dyed archaeological textiles by surface-enhanced Raman spectroscopy.
Scientific Reports **11**, 6560(2021).
92. J.I Alvarez, R. Veiga, S. Martínez-Ramírez, M. Secco, P. Faria, PN. Maravelaki, M. Ramesh, I. Papayianni and J. Válek.
RILEM TC 277-LHS report: a review on the mechanisms of setting and hardening of lime-based binding systems.
Materials and Structures/Materiaux et Constructions, **54**, p.63 (2021).

93. M. Martín-Garrido and S. Martínez-Ramírez.
CO₂ adsorption on calcium silicate hydrate gel synthesized by double decomposition method.
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry **143**, p.4331 (2021).
94. J. Alvarez, S. Martinez-Ramirez and E. Martinez.
Magneto-Primed Triticale Seeds Studied by Micro-Raman Spectra.
Plants **10**, p. 1083 (2021).
95. M. Frías, S. Martínez-Ramírez, R. Vigil De La Villa, L. Fernández-Carrasco and R. García.
Reactivity in cement pastes bearing fine fraction concrete and glass from construction and demolition waste: microstructural analysis of viability.
Cement and Concrete Research **148**, p. 106531. (2021).
96. M. Oujja, T. Palomar, M. Martínez-Weinbaum, S. Martínez-Ramírez and M. Castillejo.
Characterization of medieval-like glass alteration layers by laser spectroscopy and nonlinear optical microscopy.
European Physical Journal Plus **136**, 859 (2021).
97. R. Vigil, M. Frias Rojas, L. Fernandez Carrasco, S. Martínez-Ramírez, E. Villar Cociña and R. García Giménez.
Reactivity of binary construction and demolition waste mix as supplementary cementitious materials.
Materials **14**, p. 6481 (2021).
98. V. Flores-Sasso, G. Pérez, L. Ruiz-Valero, S. Martínez-Ramírez, A. Guerrero and E. Prieto-Vicioso.
Physical and Chemical Characterisation of the Pigments of a 17th-Century Mural Painting in the Spanish Caribbean.
Materials **14**, p. 6866 (2021).
99. Browne, F.; Chen, S.; Doornenbal, P.; Obertelli, A.; Ogata, K.; Utsuno, Y.; Yoshida, K.; Achouri, N.L.; Baba, H.; Calvet, D.; Château, F.; Chiga, N.; Corsi, A.; Cortés, M.L.; 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.; Rodriguez, W.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Steffenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Aktas, O.; Aumann, T.; Boretzky, K.; Caesar, C.; Chung, L.X.; Flavigny, F.; Franchoo, S.; Gasparic, I.; Gerst, R.B.; Gibelin, J.; Vaquero, V.
Pairing Forces Govern Population of Doubly Magic Ca 54 from Direct Reactions.
Physical Review Letters **126**, 252501 (2021).
100. L. Caneda; M. Monasterio; J. Moreno; S. Martínez-Ramírez; R. García; M. Frías
Behaviour and Properties of Eco-Cement Pastes Elaborated with Recycled Concrete Powder from Construction and Demolition Wastes.
Materials **14**, 1299 (2021).
101. Juhász, M.M.; Elekes, Z.; Sohler, D.; Sieja, K.; Yoshida, K.; Ogata, K.; Doornenbal, P.; Obertelli, A.; Baba, H.; Browne, F.; Calvet, D.; Château, F.; Chen, S.; Chiga, N.; Corsi, A.; Cortés, M.L.; Delbart, A.; Gheller, J.M.; Giganon, A.; Gillibert, A.; Hilaire, C.; Isobe, T.; Kobayashi, T.; Kubota, Y.; Lapoux, V.; Motobayashi, T.; Murray, I.; Otsu, H.; Panin, V.; Paul, N.; Rodriguez, W.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Steffenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Achouri, N.L.; Aktas, O.; Aumann, T.; Chung, L.X.; Dombrádi, Z.; Flavigny, F.; Franchoo, S.; Gašparič, I.; Gerst, R.B.; Vaquero, V.
First spectroscopic study of ν 63 at the N=40 island of inversion.
Physical Review C **103**, 064308 (2021).
102. Juhász, M.M.; Elekes, Z.; Sohler, D.; Utsuno, Y.; Yoshida, K.; Otsuka, T.; Ogata, K.; Doornenbal, P.; Obertelli, A.; Baba, H.; Browne, F.; Calvet, D.; Château, F.; Chen, S.; Chiga, N.; Corsi, A.; Cortés, M.L.; Delbart, A.; Gheller, J.M.; Giganon, A.; Gillibert, A.; Hilaire, C.; Isobe, T.; Kobayashi, T.; Kubota, Y.; Lapoux, V.; Motobayashi, T.; Murray, I.; Otsu, H.; Panin, V.; Paul, N.; Rodriguez, W.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Steffenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Achouri, N.L.; Aktas, O.; Aumann, T.; Chung, L.X.; Dombrádi, Z.; Flavigny, F.; Franchoo, S.; Gašparič, I.; Vaquero, V.
First spectroscopic study of 51Ar by the (p,2p) reaction.
Physics Letters B **814**, 136108 (2021).
103. Linh, B.D.; Corsi, A.; Gillibert, A.; Obertelli, A.; Doornenbal, P.; Barbieri, C.; Chen, S.; Chung, L.X.; Duguet, T.; Gómez-Ramos, M.; Holt, J.D.; Moro, A.; Navrátil, P.; Ogata, K.; Phuc, N.T.T.; Shimizu, N.; Somà, V.; Utsuno, Y.; Achouri, N.L.; Baba, H.; Browne, F.; Calvet, D.; Château, F.; Chiga, N.; Cortés, M.L.; Delbart, A.; Gheller, J.M.; Giganon, A.; Hilaire, C.; Isobe, T.; Kobayashi, T.; Kubota, Y.; Lapoux, V.; Liu, H.N.; Motobayashi, T.;

Murray, I.; Otsu, H.; Panin, V.; Paul, N.; Rodriguez, W.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Stepenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Vaquero, V.
Investigation of the ground-state spin inversion in the neutron-rich isotopes.
 Physical Review C **104**, 4 (2021).

104. Wimmer, K.; Recchia, F.; Lenzi, S.M.; Riccetto, S.; Davinson, T.; Estrade, A.; Griffin, C.J.; Nishimura, S.; Phong, V.; Söderström, P.A.; Aktas, O.; Al-Aqeel, M.; Ando, T.; Baba, H.; Bae, S.; Choi, S.; Doornenbal, P.; Ha, J.; Harkness-Brennan, L.; Isobe, T.; John, P.R.; Kahl, D.; Kiss, G.; Kojouharov, I.; Kurz, N.; Labiche, M.; Matsui, K.; Momiyama, S.; Napoli, D.R.; Niikura, M.; Nita, C.; Saito, Y.; Sakurai, H.; Schaffner, H.; Schrock, P.; Stahl, C.; Sumikama, T.; Werner, V.; Witt, W.; Woods, P.J.
Isomeric states in neutron-rich nuclei near N=40.
 Physical Review C **104**, 1 (2021).
105. Wimmer, K.; Korten, W.; Doornenbal, P.; Arici, T.; Aguilera, P.; Algorta, A.; Ando, T.; Baba, H.; Blank, B.; Bosso, A.; Chen, S.; Corsi, A.; Davies, P.; de Angelis, G.; de France, G.; Delaroche, J-P; Doherty, D. T.; Gerl, J.; Gernhaeuser, R.; Girod, M.; Jenkins, D.; Koyama, S.; Motobayashi, T.; Nagamine, S.; Niikura, M.; Obertelli, A.; Libert, J.; Lubos, D.; Rodriguez, T. R.; Rubio, B.; Sahin, E.; Saito, T. Y.; Sakurai, H.; Sinclair, L.; Stepenbeck, D.; Taniuchi, R.; Wadsworth, R.; Zielinska, M.
Shape Changes in the Mirror Nuclei Kr-70 and Se-70.
 Physical Review Letters **126**, 7 (2021).
106. Yaohui Zhan; Lei Zhang; Mohsen Rahmani; Vincenzo Giannini; Andrey E. Miroshnichenko; Minghui Hong; Xiaofeng Li; Stefan A. Maier; Dangyuan Lei.
Synthetic Plasmonic Nanocircuits and the Evolution of Their Correlated Spatial Arrangement and Resonance Spectrum.
 ACS Photonics **8**, 166-174 (2021).
107. Scomparin, L.; Marchi, T.; de Angelis, G.; Baumann, T.; Bazin, D.; Gade, A.; Gottardo, A.; Gramegna, F.; John, P.R.; Klintefjora, M.; Kolos, K.; Lenzi, S.M.; Mengoni, D.; Michelagnoli, C.; Modamio, V.; Napoli, D.R.; Noji, S.; Pereira, J.; Recchia, F.; Sahin, E.; Valiente-Dobón, J.J.; Wimmer, K.; Weisshaar, D.; Zegers, R.
Proton inelastic scattering in 68,70,72Ni isotopes.
 Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica C **44**, 77 (2021).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

108. M. Accolla, G. Santoro, P. Merino, L. Martínez, G. Tajuelo-Castilla, L. Vázquez, J. M. Sobrado, M. Agúndez, M. Jiménez-Redondo, V. J. Herrero, I. Tanarro, J. Cernicharo, and J. A. Martín-Gago.
Silicon and Hydrogen chemistry under laboratory conditions mimicking the atmosphere of evolved stars.
 The Astrophysical Journal, **906**:44 (7pp) (2021).
109. I. Chizhmakova, A.V. Nikitin, R. Z. Martínez, D. Paredes-Roibás, D. Bermejo, E. Starikova and V.G. Tyuterev.
Modelling of the 2v1-v1 and v1 band transitions of 13CH4 using high resolution Raman spectroscopy measurements.
 Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **270**, 107682 (2021).
110. Francisco Colmenero and Vicente Timón.
Mechanical anomalies in mercury oxalate and the deformation of the mercury cube coordination environment under pressure.
 Applied Physics A **127**, 395 (2021)
111. M. I. Hernández, G. Tejeda, J. M. Fernández, and S. Montero.
Rate coefficients for H₂:H₂ inelastic collisions in the ground vibrational state from 10 to 1000 K.
 Astronomy&Astrophysics **647**, A155 (2021).
112. Belén Maté, Ricardo Carrasco, Vicente Timón, Isabel Tanarro, Victor J. Herrero, Héctor Carrascosa, Guillermo M. Muñoz Caro, Cristóbal González-Díaz, Izaskun Jiménez-Serra.
2-aminooxazole in astrophysical environments: IR spectra and destruction cross sections for energetic processing.
 The Astrophysical Journal, **909**:123 (16pp) (2021).
113. Belén Maté, Miguel Angel Satorre, and Rafael Escrivano.
On the spectral features of dangling bonds in CH₄/H₂O amorphous ice mixtures.
 Physical Chemistry Chemical Physics **23**, 9532-9538 (2021).

114. Denís Paredes-Roibás, Raúl Z. Martínez, Hubert Józwiak and Franck Thibault.
Collisional line broadening and mixing in the Raman spectrum of CO perturbed by N₂: Experimental measurements and theoretical calculations.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **275**, 107868 (2021).
115. Vicente Timón, Belén Maté, Victor J. Herrero, and Isabel Tanarro.
Infrared spectra of amorphous and crystalline urea ices.
Physical Chemistry Chemical Physics **23**, 22344 (2021).
116. V. Sáez-Rábanos, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz, and V. J. Herrero
The F+HD ($v=0,1$; $j=0,1$) reactions: sterodynamical properties of orbiting resonances
Physical Chemistry Chemical Physics **23**, 8002 (2021).
117. Thomas Salomon, José L. Doménech, Philipp C. Schmid, Ernest A. Michael, Stephan Schlemmer and Oskar Asvany.
Rovibrational spectroscopy of the CH⁺-He and CH⁺-He₄ complexes.
Journal of Molecular Spectroscopy **377**, 111421 (2021).

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

118. V.L. Cruz, J. Ramos, J. Martinez-Salazar, M. Montalban-Lopez, M. Maqueda.
The role of key amino acids in the antimicrobial mechanism of a bacteriocin model revealed by molecular simulations.
Journal of Chemical Information and Modeling **61** (12), 6066-6078 (2021).
119. SX. Drakopoulos, GC. Psarras, A. Nogales, TA. Ezquerra, T. Kim, AB. Robbins, AJ. Minnich, GC. Manika, G. Claudio, I. Martin-Fabiani, S. Ronca.
Gold/ultra-high molecular weight polyethylene nanocomposites for electrical energy storage: Enhanced recovery efficiency upon uniaxial deformation.
Journal of Applied Polymer Science, **138**(42) 51232 (2021).
120. A. Espasa-Valdepeñas, J.F. Vega, V. Cruz, J. Ramos, A.J. Müller and J. Martínez-Salazar.
Revisiting polymer-particle interaction in PEO solutions.
Langmuir **37** (13), 3808-3816 (2021).
121. Flores, A.; Quiles-Díaz, S.; Enrique-Jimenez, P.; Martínez-Gómez, A.; Gómez-Fatou, M.A.; Salavagione, H.J.
Understanding the reinforcement of graphene in poly(Ether ether ketone)/carbon fibre laminates.
Polymers **13**, 2440 (2021).
122. E. Gutiérrez-Fernández, J. Cui, DE. Martínez-Tong, A. Nogales.
Preparation, Physical Properties and Applications of Water-Based Functional Polymer Ink.
Polymers, 13(9), 1419 (2021).
123. E. Gutiérrez-Fernández, TA. Ezquerra, A. Nogales, E. Rebollar.
Straightforward patterning of functional polymers by sequential nanosecond pulsed laser.
Nanomaterials, **11**(5), 1123 (2021).
124. E. Gutiérrez-Fernández, TA. Ezquerra, E. Rebollar, J. Cui, S. Marina, J. Martín, A. Nogales.
Photophysical and structural modulation of poly(3-hexylthiophene) nanoparticles via surfactant-polymer interaction.
Polymer, **218**, 123515 (2021).
125. E. Gutiérrez-Fernández, A. Rodríguez-Rodríguez, MC. García-Gutiérrez, A. Nogales, E. Rebollar, E. Solano, TA. Ezquerra.
Photoinduced Resist-free Imprinting (PRI) in Fullerene Thin Films as Revealed by Grazing Incidence Small-angle X-ray Scattering.
Applied Surface Science, 548, 149254 (2021)

126. I. Irska, S. Paszkiewicz, D. Pawlikowska, J. Dryzek, A. Linares, A. Nogales, TA. Ezquerra, E. Piesowicz.
Relaxation Behavior and Free Volume of Bio-based poly(trimethylene terephthalate)-block-poly(caprolactone) copolymers as revealed by Broadband Dielectric and Positron Annihilation Lifetime Spectroscopies.
Polymer, **229**, 123949 (2021).
127. M. Palenzuela, L. Valenzuela, G. Amariei, J.F. Vega, M.E.G. Mosquera and R. Rosal.
Poly(glycidyl methacrylate) macromolecular assemblies as biocompatible nanocarrier for the antimicrobial lysozyme.
International Journal of Pharmaceutics **603**, 120695 (2021).
128. MI. Peñas, C. Ocando, E. Penott-Chang, M. Safari, TA. Ezquerra, E. Rebollar, A. Nogales, R. Hernández, A. Müller.
*Nanostructural organization of thin films prepared by sequential Dip-Coating deposition of poly(butylene succinate), poly(*e*-caprolactone) and their copolymers (PBS-ran-PCCL).*
Polymer, **226**, 123812 (2021).
129. J. Ramos, J.F. Vega and J. Martínez-Salazar.
A computer simulation of the effect of temperature on melt chain dimensions of random short chain branched polyethylene.
Polymer **225**, 123772 (2021).
130. PM. Resende, E. Gutiérrez-Fernández, MH. Aguirre, A. Nogales, M. Martín-González.
Polyethylene three-dimensional nano-networks: How lateral chains affect metamaterial formation.
Polymer, **212**(1), 123145 (2021).
131. I. Reviejo, J. Vinuela, J. Ramos, M.E.G. Mosquera, V. Tabernero and G. Jiménez.
Stereospecific synthesis of chiral titanium complexes bearing a bifunctionalized cyclopentadienyl-terpenoid ligand derived from α -pinene.
Organometallics **40** (17), 3076-3086 (2021).
132. V. Souza-Egipsy, J.F. Vega, E. González-Toril and A. Aguilera.
Biofilm mechanics in an extremely acidic environment: microbiological significance.
Soft Matter **17** (13), 3672-3680 (2021).
133. I. Taraghi, S. Paszkiewicz, I. Irska, A. Szymczyk, A. Linares, TA. Ezquerra, M. Kurcz, M. Winkowska- Struzik, L. Lipinska, K. Kowiorski, E. Piesowicz.
Thin polymer films based on poly(vinyl alcohol) containing graphene oxide and reduced graphene oxide with functional properties.
Polymer Engineering and Science, **61**(6), 1685 (2021).
134. Taraghi, Iman; Paszkiewicz, Sandra; Fereidoon, Abdolhosein; Szymczyk, Anna; Stanik, Rafal; Gude, Maik; Linares, Amelia; Ezquerra, Tiberio A.; Piesowicz, Elzbieta; Wilpiszewska, Katarzyna; Roslaniec, Zbigniew.
Thermally and electrically conducting polycarbonate/elastomer blends combined with multiwalled carbon nanotubes.
Journal of Thermoplastic Composite Materials **34**, 1488 (2021).

6.2 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

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

1. R. Vilar, M. Crocce, G. Calcagni, J. García-Bellido, O. Mena, and P. Vielva.
Understanding the Basic Components of the Universe, its Structure and Evolution. Chapter 4: Origin and Fate of the Universe.
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 4, 69-90.
ISBN: 978-84-00-10754-3.
2. F. Najarro, J.R. Goicoechea, G. Anglada, A. Serenelli, P. Sarriguren, J.L. Taín, M. García, I. Jiménez-Serra, I. Mendigutía, J.F. Gómez, T. González-Lezana, M.A. Guerrero, L.F. Miranda, and C. Sánchez-Contreras.
Understanding the Basic Components of the Universe, its Structure and Evolution. Chapter 6: Understanding the Cycle of Matter in the Universe.
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 6, 108-132.
ISBN: 978-84-00-10754-3.
3. T. Ortín, G. Calcagni, G. Ballesteros, C. Barceló, J.L. Fernández Barbón, O. García Prada, J.L. Gómez, F. Marchesano, G.A. Mena Marugán, G.J. Olmo, and C.F. Sopuerta.
Understanding the Basic Components of the Universe, its Structure and Evolution. Chapter 7: Gravity.
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 7, 135-152.
ISBN: 978-84-00-10754-3.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DEPARTAMENTO DE ENVYMED

PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

4. R. Aguado, M.J. Calderón, N. Crivillers, V. Giannini, A. Gómez, T. González Lezana, V. Lalíena, R. Molina, F. Pérez, D. Pérez García, G. Platero, G. Rius, Ll. Serra, and R. Zambrini.
Digital and Complex Information. Chapter 3: Quantum Computing.
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 3, 56-76.
ISBN: 978-84-00-10756-7.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

PUBLICATIONS IN COMMON WITH MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

5. R. Aguado, L. Fonseca, M. Gich, G. Herranz, C. Horrillo, R. Jiménez, B. Linares, B. Martínez, M. Mas, R. Molina, A. Nogales, A. Palau, E. Ramon, G. Rius, I. Sayago, T. Stauber, and J.M. de Teresa.
Digital and Complex Information. Chapter 1: Intelligent and Sustainable Electronic Devices and Systems.
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 1, 22-36.
ISBN: 978-84-00-10756-7.

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

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

PUBLICATIONS IN COMMON WITH MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

6. V. Giannini, A. González, G. Herranz, L. Lechuga, B. Linares, C. López, L. Martín-Moreno, H. Míguez, A. Mihi, A. Nogales, L. Pesquera, P. Aitor Postigo, A. Quirce, E. Rebollar, J. A. Sánchez Gil, T. Serrano, J. Solis, T. Stauber, A. Valle, and R. Zambrini.
Digital and Complex Information. Chapter 2: Advanced Photonics
Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 2, 36-55.
ISBN: 978-84-00-10756-7.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS
PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

R. Aguado, M.J. Calderón, N. Crivillers, V. Giannini, A. Gómez, T. González Lezana, V. Lalíena, R. Molina, F. Pérez, D. Pérez García, G. Platero, G. Rius, Ll. Serra, and R. Zambrini.

Digital and Complex Information. Chapter 3: Quantum Computing.

Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 3, 56-76.

ISBN: 978-84-00-10756-7.

6.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

7. G. Anglada-Escudé, M. J. Jurado, G. Busquet, J. A. Caballero, J. L. Domenech, J. R. Goicoechea, F. Gómez, J. C. Gómez, J. M. Girart, V. J. Herrero, E. Martín, P. Martín, M. Osorio, V. Parro, O. Prieto-Ballesteros, D. Riaño, I. Ribas, A. Serenelli, J. M. Trigo-Rodríguez, D. Vigano.
Challenge 5: In Search of Life.
White Paper 12: Our Future? Space Colonization & Exploration, p 123-143
L. M. Lara & Gildas Léger (eds)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), 2021
ISBN: 978-84-00-10760-4

8. O. Prieto Ballesteros, J. Ceballos Cáceres, J. L. Domenech, D. García Castellanos, J. García Guinea, F. González Galindo, J. Gómez Elvira, F. Gómez, J. C. Gómez Martín, P. J. Gutiérrez, M. G. Llorens, E. Mateo Martí, A. Molina Jurado, G. Muñoz Caro, O. Muñoz Gómez, V. Muñoz Iglesias, M. Osorio Gutiérrez, J. Pla García, J. A. Rodríguez Manfredi, L. Sánchez Muñoz, J. M. Trigo-Rodríguez, M. P. Zorzano.
Challenge 2: Future Voyages to the Solar System.
White Paper 12: Our Future? Space Colonization & Exploration, p. 43-69
L. M. Lara & Gildas Léger (eds)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), 2021
ISBN: 978-84-00-10760-4

6.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS
PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

R. Aguado, L. Fonseca, M. Gich, G. Herranz, C. Horrillo, R. Jiménez, B. Linares, B. Martínez, M. Mas, R. Molina, A. Nogales, A. Palau, E. Ramon, G. Rius, I. Sayago, T. Stauber, and J.M. de Teresa.

Digital and Complex Information. Chapter 1: Intelligent and Sustainable Electronic Devices and Systems.

Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 1, 22-36.

ISBN: 978-84-00-10756-7.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DEPARTAMENTO DE ENVYMED
PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

V. Giannini, A. González, G. Herranz, L. Lechuga, B. Linares, C. López, L. Martín-Moreno, H. Míguez, A. Mihi, A. Nogales, L. Pesquera, P. Aitor Postigo, A. Quirce, E. Rebollar, J. A. Sánchez Gil, T. Serrano, J. Solis, T. Stauer, A. Valle, and R. Zambrini.

Digital and Complex Information. Chapter 2: Advanced Photonics

Serie: CSIC Scientific Challenges: Towards 2030.

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC, 2021), Chapter 2, 36-55.

6.3 TESIS DOCTORALES PH.D. THESES

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

Title: Temas selectos en física cuántica de muchos cuerpos: sistemas cuánticos integrables abiertos, el método variacional de la matriz densidad reducida y aislantes topológicos.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 7th of June 2021

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: Álvaro Rubio García

Supervisor: Jorge Dukelsky, Rafael Alejandro Molina Fernández and Juan José García Ripoll

Title: Étude Ab-initio d'Espèces CnH du Milieu Interstellaire.

University: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Ciencias y Tecnología Houari Boumediene de Argel (Argelia)

Date: 10th of April 2021

Mark: “Très Honorable”

Candidate: Sara Cherifa Bennedjai

Supervisor: María Luisa Senent Diez

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

Title: Explorando la estructura de halo a través de la dispersión entorno a la barrera en ^{208}Pb : los casos de ^{15}C y ^{17}Ne .

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 10th of December 2021

Mark: Sobresaliente “Cum Laude”

Candidate: Javier Díaz Ovejas

Supervisor: Olof Tengblad, María José García Borge and I. Martel Bravo

Title: In-beam g-ray spectroscopic studies near doubly magic nuclei ^{56}Ni and ^{208}Pb .

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 18th of October 2021

Mark: Sobresaliente “Cum Laude”

Candidate: Álvaro Fernández Martínez

Supervisor: Andrea Jungclaus

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

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

Title: Effects of a Scalar Field Potential on Primordial Perturbations in Hybrid (Loop) Quantum Cosmology.

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 5th of July 2021

Mark: 9’5

Candidate: Rafael Jiménez Llamas

Supervisor: Guillermo Antonio Mena Marugán

Title: Classical and Quantum Nonlocal Gravity.

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 5th of July 2021

Mark: 9.0

Candidate: Arnau Bas i Beneito

Supervisor: Gianluca Calcagni

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

Title: Experimental tests of a scanner prototype for medical imaging with protons developed at IEM-CSIC.

Type: Master thesis (TFM)

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2021

Candidate: Amanda Nathali Nerio Aguirre

Supervisor: José Antonio Briz Monago and María José García Borge

Title: Desarrollo del sistema de control del calorímetro CALIFA.

Type: Master thesis (TFM)

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2021.

Candidate: Ángel Perea Martínez

Supervisor: María José García Borge

Title: Estudio de capturas radiográficas de fantomas gruesos empleando el prototipo de escáner de protones del IEM-CSIC.

Type: Master thesis (TFM)

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2021

Candidate: Carlos Ballesteros Bejarano

Supervisor: José Antonio Briz Monago and María José García Borge

Title: Reconstrucción de imágenes tomográficas del prototipo de escáner pCT del IEM.

Type: Master thesis (TFM)

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2021.

Candidate: Pedro Martínez Moreno

Supervisor: José Antonio Briz Monago and María José García Borge

Title: Estudio de la respuesta luminosa del detector CEPA a la radiación gamma en función de la posición de la fuente.

Type: Grado en ciencias experimentales (TFG)

University: Universidad Rey Juan Carlos

Date: Julio of 2021

Candidate: Katixa Silva Rodríguez

Supervisor: José Antonio Briz Monago, María José García Borge and Olof Tengblad

Title: Investigating polarization conversion in a planar array of High Refractive Index all-dielectric nanospheres using the Coupled Electric and Magnetic Dipole formulation.

Type: Master thesis

University: Department of Information Engineering, Università degli Studi di Padova

Date: September 2021

Mark: Sobresaliente

Candidate: Ruhinda Kabonire

Supervisor: José Antonio Sánchez Gil

Title: Characterization of two early blue synthetic dyes by means of UV-Vis, Raman, and Surface-enhanced Raman scattering spectroscopies.

Type: Master thesis

University: Faculty of Mathematical, Physical and Natural Sciences, University of Rome “La Sapienza”

Date: October 2021

Mark: Sobresaliente “Cum Laude”

Candidate: Michela Rampa

Supervisor: M^a Vega Cañamares Arribas

Title: Identificación de microplásticos en agua de mar.

Type: Grade thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: June 2021

Mark: Apto

Candidate: Luis Diego Amadasí

Supervisor: Sagrario Martínez Ramírez

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: Estudio de nanopartículas de carbono amorfo hidrogenado como análogo de los granos de polvo presentes en el medio interestelar.

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 24th of June 2021

Mark: Sobresaliente

Candidate: Ricardo Carrasco Herrera

Supervisors: Belén Maté Naya and Isabel Tanarro Onrubia

Capítulo 7

TABLAS Y DATOS

Chapter 7

TABLES AND DATA

7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
Number of ISI publications	155	159	148	146	156	156	134
Number of non-ISI publications	16	4	3	2	3	3	0
Total stock of PhD fellowships and contracts	18	16	18	17	19	19	19
Number of PhD Theses defended	7	8	4	4	3	3	4
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	88	89	57,3	87	171	89,2	159

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	IMPACT FACTOR (JCR -2020)	NUMBER OF PAPERS
Nature Reviews Physics	31.068	1
Physics Reports	25.600	1
Laser and Photonics Reviews	13.138	1
Cement and Concrete Research	10.933	1
Carbon	9.594	1
Physical Review Letters	9.161	3
Nanophotonics	8.449	2
ACS Photonics	7.529	2
Food Chemistry	7.514	1
Applied Surface Science	6.707	1
Cancers	6.639	1
SciPost Physics	6.093	1
Astrophysical Journal	5.877	3
International Journal of Pharmaceutics	5.875	1
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	5.839	2
Journal of High Energy Physics	5.810	3
Astronomy and Astrophysics	5.803	1
Physical Review D	5.296	9
Frontiers in Chemistry	5.221	1
Nanomaterials	5.076	3
Journal of Chemical Information and Modeling	4.956	1
Biomolecules	4.879	1
Physics Letters B	4.771	6
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry	4.626	1
Polymer	4.430	5
Molecules	4.412	1
Scientific Reports	4.380	1
Polymers	4.329	2
Spectrochimica Acta - Part A	4.098	1

Physical Review B	4.036	2
Plants-Basel	3.935	1
European Physical Journal Plus	3.911	3
Optics Express	3.894	1
Langmuir:the ACS journal of surfaces and colloids	3.882	1
Organometallics	3.876	1
New Journal of Physics	3.732	1
Soft Matter	3.679	1
Physical Chemistry Chemical Physics	3.676	3
Materials	3.623	1
Classical and Quantum Gravity	3.528	5
Journal of Chemical Physics	3.488	1
ACS Earth and Space Chemistry	3.475	1
Materials and Structures/Materiaux et Constructions	3.428	1
Chemosensors	3.398	1
Journal of Thermoplastic Composite Materials	3.330	1
Physical Review C	3.296	19
Journal of Raman Spectroscopy	3.133	1
Journal of Applied Polymer Science	3.125	1
European Physical Journal A	3.043	2
Journal of Nuclear Materials	2.936	1
ChemPlusChem	2.863	1
Symmetry-Basel	2.713	2
Applied Sciences-Basel	2.679	2
Physics Letters A	2.654	1
Applied Physics A: Materials Science and Processing	2.584	1
Vibrational Spectroscopy	2.507	1
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer	2.468	2
Polymer Engineering and Science	2.428	1
Universe	2.278	2
Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment	2.231	1
Modern Physics Letters A	2.066	1
Journal of Molecular Spectroscopy	1.507	1
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1.455	1
Few-Body Systems	1.362	1
ACS Applied Nano Materials		2
Computational Brain and Behavior		1
Frontiers in Astronomy and Space Sciences		2
Nuovo Cimento C-Colloquia and Communications in Physics		1
Physical Review Research		1
TOTAL:	Average Impact Factor: 4,80	134

7.3 EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS

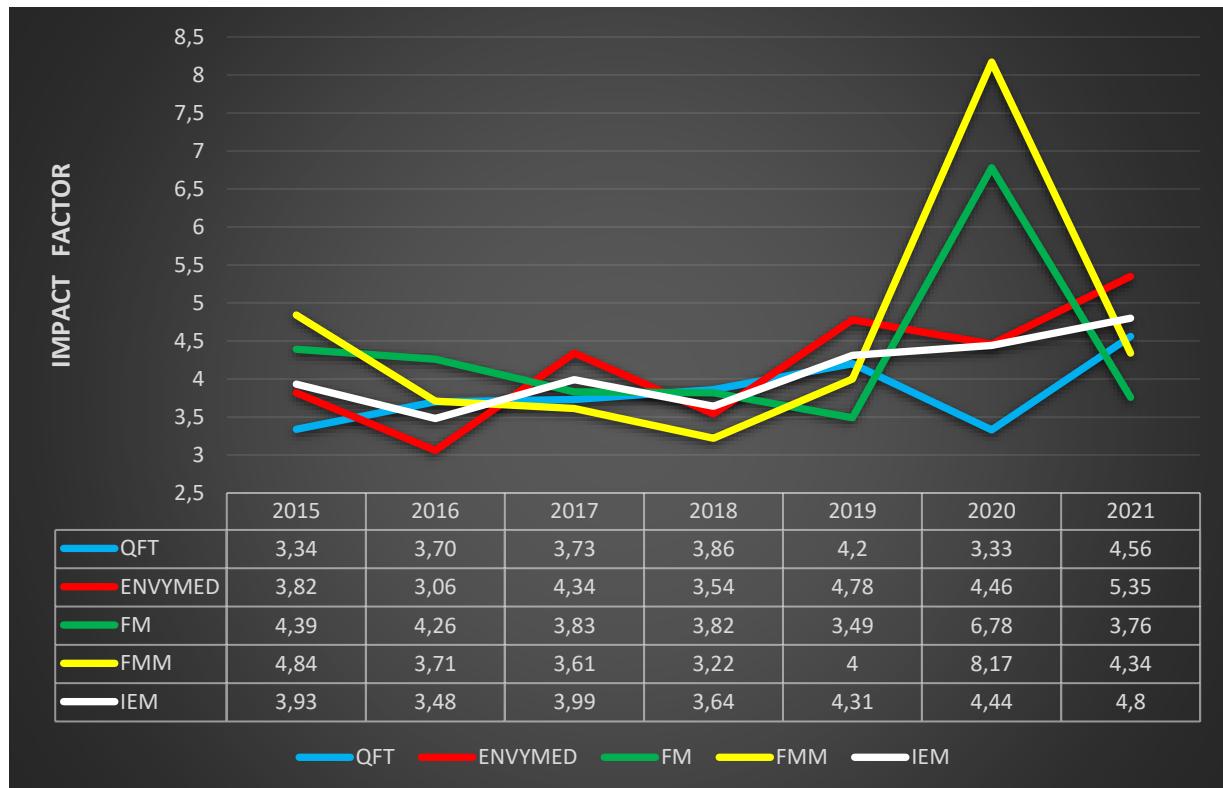
Department Key:

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

Departmen t	Scientific Staff		“Ramón & Cajal”		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1			1		3				11	1	12
ENVYME D	6	4		1			9	1	1	2	16	8	24
FM	9	2			1		1		2		13	2	15
FMM	5	4					2		1	2	8	6	14
ADMON.									2	9	2	9	11
IEM	27	11		1	2		15	1	6	13	50	26	76

¹“Authorized Stay” excluded

(M: Male, F: Female. See also the “Department Key” in section 7.3)

Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados / Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 74

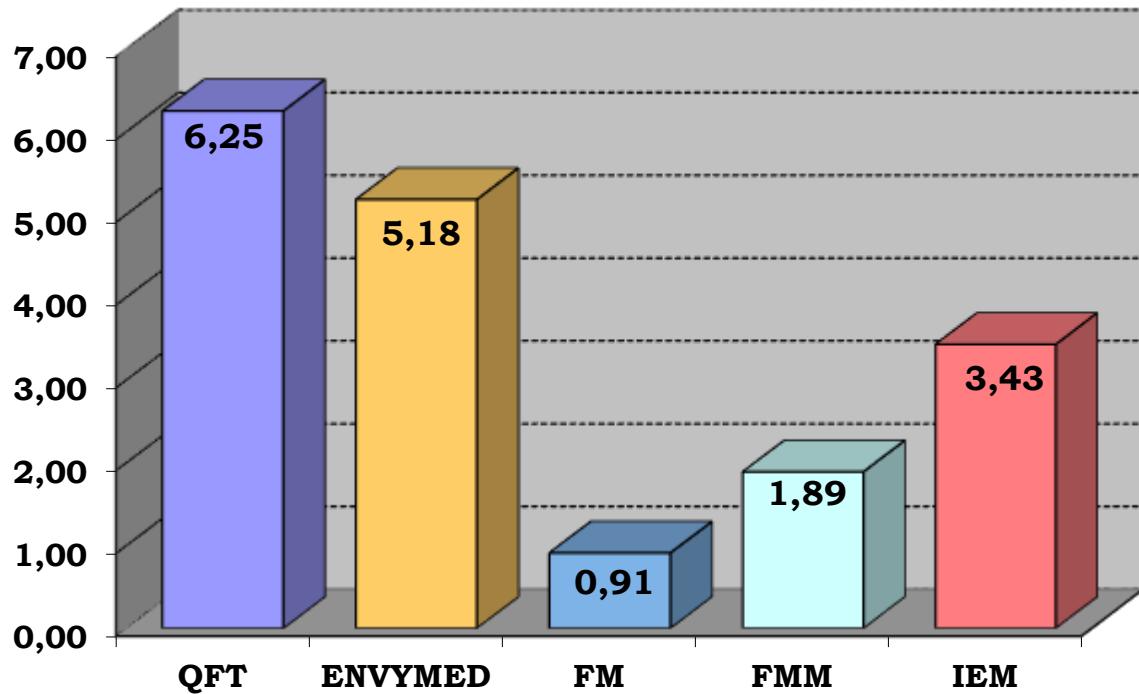
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	50	57	10	17	134
Other publications	5 (2)¹	1 (1)¹	2	(2)¹	8

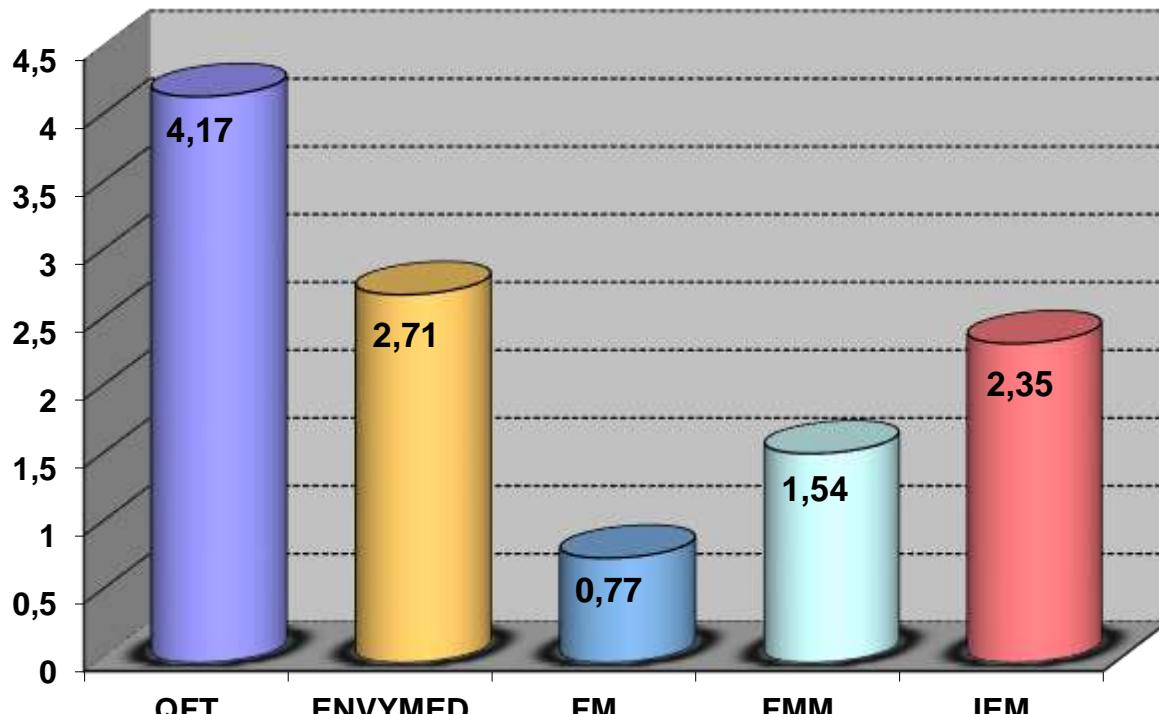
ed with other Departments.

¹In
pare
nthe
sis,
pape
rs
shar

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): 3,53
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher