

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

**MEMORIA DE LA LABOR REALIZADA
DURANTE EL AÑO 2008**

ANNUAL REPORT 2008



Consejo Superior de
Investigaciones Científicas

Serrano 113bis, 119, 121, 123 – 28006 Madrid

The background of the cover is a grayscale photograph of a courtyard. In the center is a large, octagonal stone fountain with a central spout. The fountain is set on a paved area with large, irregular stone tiles. In the background, there is a brick building with several large, arched openings. Lush trees and bushes are visible around the building and fountain.

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

**CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS**

**MEMORIA
DE LA LABOR REALIZADA
DURANTE EL
AÑO 2008**

ANNUAL REPORT 2008

INTRODUCCIÓN

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

El IEM fue fundado en 1976 por el Prof. Eduardo Primo Yúfera, que en aquel momento era también el Presidente del CSIC. El primer director del Instituto fue el Prof. Alfredo Tiemblo. Inicialmente el Instituto se formó gracias a la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos, siendo entonces tan solo cinco los científicos en plantilla. Ya en 2008, los más de cincuenta científicos de plantilla del Instituto alcanzaban a cubrir un amplio espectro de líneas de investigación. La misión básica del Instituto es contribuir al avance del conocimiento de la estructura de la materia en un amplio rango de escalas, desde constituyentes de la materia y del espacio-tiempo, hasta núcleos, átomos, moléculas y macromoléculas, incluyendo materia condensada y sistemas mesoscópicos.

Las actividades de investigación estaban organizadas en 2008 alrededor de seis Departamentos, con Grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcaban la Física Gravitacional, Nuclear, Estadística, Atómica, Molecular y Macromolecular, y, en un contexto más restringido, la Biofísica. Parte de esta investigación hace uso de grandes instalaciones nacionales e internacionales; éste es el caso por ejemplo en Física Nuclear Experimental, Física Estadística y Física Macromolecular.

El IEM es uno de los aproximadamente veinte Institutos del Área de Física y Tecnología Físicas del CSIC. Está encabezado por un Director, dos Vicedirectores y un Gerente, así como por una Junta de Instituto, que se selecciona de entre la plantilla científica, técnica y administrativa del Instituto. La junta está formada por el Director, los dos Vicedirectores, el Gerente, los Jefes de cada uno de los Departamentos y cuatro representantes de personal.

El Claustro Científico del Instituto está formado por todos los investigadores en plantilla del mismo, bajo la presidencia del Director, con un Secretario elegido entre el personal científico.

Departamentos:

- Química y Física Teóricas (QFT),
- Física Nuclear y Física Estadística (FNFE),
- Física Molecular (FM),
- Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR),
- Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos (EVPM),
- Física Macromolecular (FMM).

En 2008, el Instituto estaba formado por 134 miembros distribuidos entre los seis departamentos arriba mencionados, además del personal de Administración.

Desde 1994, el IEM forma parte del Centro de Física Miguel Antonio Catalán (CFMAC), cuyos departamentos y laboratorios se distribuyen entre cuatro edificios del campus del CSIC en la calle Serrano de Madrid, edificios que comparte con los otros Institutos del Centro (Instituto de Óptica e Instituto de Física Fundamental) además del Instituto Rocasolano de Físico-Química.

INTRODUCTION

The “Instituto de Estructura de la Materia” (IEM) aims at being a modern and ambitious research institute, firmly embedded and highly visible within CSIC, but also within Spain, Europe and worldwide. With a reputation of excellence, the Institute aims for visibility and attractiveness for students, staff and visitors.

The IEM was established in 1976 by Prof. Eduardo Primo Yúfera, who was at that time the President of CSIC. The first Director of the Institute was Prof. Alfredo Tiemblo. Initially, the Institute was formed by several researchers working on the fields of Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry, and Crystalline Polymers, with only five scientists belonging to the staff of the Institute. Already in 2008, a broad spectrum of research lines was covered by more than 50 staff scientists. The mission of the Institute is to contribute to the advance in the knowledge of the structure of matter at an ample range of physical scales, from the building blocks of matter and space time, to nuclei, atoms, molecules, and macromolecules, including condensed matter and mesoscopic systems.

In 2008, the research activities were organized around Departments, with experimental and theoretical groups covering fields of gravitational, nuclear, statistical, atomic, molecular, and macromolecular physics, and, in a more restricted context, of biophysics. Part of the research is carried out at national and international facilities; this is the case for example in experimental nuclear physics, statistical physics, and macromolecular physics.

IEM is one of the around twenty Institutes in the Area of Physics and Physical Technology of CSIC. It is run by a Director, two Vice-Directors, and a Managing Secretary, as well as by a Board (Junta de Instituto), selected from the scientific, technical and administrative staff of the Institute. The Board is formed by the Director, the two Vice-Directors, the Managing Secretary, one scientist from each department (Heads of Department) and four Staff Representatives.

In addition, IEM has a Scientific Faculty (Claustro Científico) which consists of all the staff-researchers of the Institute under the Presidency of the Director, with a Secretary selected from the scientific staff.

List of Departments:

- Department of Theoretical Physics and Chemistry (QFT)
- Department of Nuclear Physics and Statistical Physics (FNE)
- Department of Molecular Physics (FM)
- Department of Molecular and Infrared Astrophysics (DAMIR)
- Department of Vibrational Spectroscopy and Multiphoton Processes (EVPMF)
- Department of Macromolecular Physics (FMM)

In 2008, the total IEM staff added up to 134 members distributed in the six departments mentioned above and a Financial and Administrative Management Office.

Since 1994, IEM belongs to the Center of Physics Miguel Antonio Catalán (CFMAC) and its departments and Laboratories spread over four buildings in the CSIC Campus of Serrano, shared with other Institutes (the Optics Institute and the Fundamental Physics Institute, which belong also to the CFMAC, and the Rocasolano Institute for Physical Chemistry).

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
STRUCTURE OF THE INSTITUTE

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director: Dr. Guillermo A. Mena Marugán (Prof. José Vicente García Ramos until 6 June 2008)

Vicedirector: Dr. Eduardo Garrido Bellido (Since 9 July 2008. Dr. Guillermo A. Mena Marugán until 6 June 2008)

Vicedirectora/Vicedirector: Dra. Aurora Nogales Ruiz (Since 5 May 2008)

Gerente / Manager: Dña. Pilar Criado Escribano

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente/President: Dr. Guillermo A. Mena Marugán (Prof. José Vicente García Ramos until 6 June 2008)

Secretaria/Secretary: Dña. Pilar Criado Escribano

Vocales/Members:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Dr. José M^a Fernández Sánchez

Prof. María José García Borge

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. José González Carmona

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Francisco Najarro de la Parra

Dra. Aurora Nogales Ruiz (Dr. Guillermo A. Mena Marugán until 6 June 2008)

Dr. José Antonio Sánchez Gil

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente: Dr. Guillermo A. Mena Marugán (Prof. José Vicente García Ramos until 6 June 2008)

Secretario: Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Dra. Almudena Alonso Herrero

Dr. Fernando Ania García

Prof. Santiago Arribas Mocoroa

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dra. María Esperanza Cagiao Escotado

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Dr. Luis Colina Robledo

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. Luis M. Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Concepción Domingo Maroto

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. María José García Borge

Prof. José Vicente García Ramos (until 6 June 2008)

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. José González Carmona

Prof. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Junglaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Prof. Jesús Martín-Pintado Martín
 Dra. Belén Maté Naya
 Prof. Salvador Montero Martín
 Dr. Francisco Najarro de la Parra
 Dra. Aurora Nogales Ruiz
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dr. Juan Ramón Pardo Carrión
 Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
 Dra. Carmen Sánchez Contreras
 Dr. Santiago Sánchez Cortés
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Dra. Magna Santos Greve
 Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dra. María Luisa Senent Díez
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Dr. Olof E. I. Tengblad
 Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Investigador Científico/ Research Scientist

Personal Científico/ Research Staff:

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Dr. Luis Garay Elizondo
 Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor
 Dr. José María Martín García

Investigador Científico / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Investigador Contratado I3P / Postdoc Contract-I3P (until 31 August 2008)
 Investigador Contratado-JdC / Postdoc Contract-JdC (since April 08)
 Investigador Contratado I3P / Postdoc Contract-I3P
 Becario Predoctoral FPI de CAM / PhD Fellowship-FPI de CAM
 Becario Predoctoral FPU / PhD Fellowship-FPU
 Becario Predoctoral I3P / PhD Fellowship-I3P
 Becario Predoctoral I3P / PhD Fellowship-I3P
 Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE (since September 2008)

Dr. Gonzalo Olmo Alba

Dr. Tomasz Henryk Pawlowski
 D. David Brizuela Cieza

D. Iñaki Garay Elizondo
 D. Daniel Gómez Vergel
 Dña. Mercedes Martín Benito
 D. Javier Olmedo Nieto

DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Prof. M^a José García Borge

Profesora de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera
 Prof. Jorge Dukelsky Bercovich
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Dra. Andrea Jungclauss
 Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dr. Olof Erik Tengblad
 Dr. Carlos Cabrillo García

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Ricardo Fernández Perea
 Dr. Carlos Essebach Benchimol
 Prof. Elvira Moya de Guerra
 Dr. Daniel Galaviz Redondo
 Dr. Rafael Molina Fernández
 Dr. Armando Relañó Pérez
 Dra. Manuela Turrión Nieves
 D. Mariano Carmona Gallardo

Dra. Aranzazu Maira Vidal

D. Javier Rodríguez Vignote

D. Jérôme Souin

D. Martín Alcorta Moreno
 D. José Antonio Briz Monago
 D. Francisco Clemente Gutierrez
 D. Mario Alberto Cubero Campos

D. Raúl de Diego Martínez
 D. Ricardo Domínguez Reyes
 Dña. Beatriz Errea Subero
 D. Miguel Madurga Flores
 D. Oscar Moreno Díaz
 Dña. Carolina Romero Redondo
 Dña. Esther Vicente Torrico
 D. Ángel Perea Martínez
 D. Rafik Boutami
 D. Ibón Bustinduy Uriarte
 D. Diego Escrig Forano
 D. Vincent Gugliertina
 D. Victor Modamio Hoybjor
 Dña. Jennifer Walker

Personal de apoyo / Support Staff:
 Dña. Purificación Corchete Corchete

Científico Titular / Tenured Scientist
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctora Vinculado / Adjoint Researcher
 Investigador Contratado-JdC / Postdoc Contract- JdC
 Investigador Contratado-I3P / Postdoc Contract-I3P
 Investigador Contratado-JdC / Postdoc Contract- JdC
 Investigador Contratado-I3P / Postdoc Contract-I3P
 Titulado Superior contratado-CSIC / University
 Graduate Contract-CSIC
 Titulado Superior contratado-CSIC / University
 Graduate Contract CSIC
 Contratado a proyecto UE / Research Project
 Contract-UE
 Titulado Superior contratado-CSIC / University
 Graduate Contract CSIC
 Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
 Becario Predoctoral- CSIC-CR / PhD Fellowship
 CSIC-CR
 Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
 Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPU
 Becario Predoctoral-FPU / PhD Fellowship-FPU
 Becario Predoctoral-FPU / PhD Fellowship-FPU
 Becaria Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P
 Becaria Predoctoral-UA / PhD Fellowship UA
 Técnico Especializado G. Medio / Technicien
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay
 Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Ayudante Investigación / Research Assistant

DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José María Fernández Sánchez

Científico Titular / Tenured Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza
 Prof. Concepción Domingo Maroto
 Prof. Rafael Escribano Torres
 Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga
 Prof. Salvador Montero Martín
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. José Luis Doménech Martínez
 Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Dra. Belén Maté Naya
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Dr. Óscar Gálvez González
 Dr. Ángel Ramos Gallardo
 Dr. Luis Rubio Lago

Dña. Judith Durá Diez
 D. Juan Hernández Morilla

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Investigador Contratado-JAE / Postdoc Contract-JAE
 Investigador Contratado-I3P / Postdoc Contract-I3P
 Investigador Contratado-JAE UA / Postdoc Contract-
 JAE UA
 Becario Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA
 Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Dña. María Encina López Arias
Dña. Beatriz Martín Llorente
Dña. Isabel Méndez Sánchez
Prof. Carlo Di Lauro

Becario Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA
Becario Predoctoral-CAM / PhD Fellowship-CAM
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Sabático / Sabbatical

Personal de apoyo / Support Staff:

D. José Manuel Castillo de Pedro
Dña. María José Malagón Sisto

D. Miguel Angel Moreno Alba

Técnico Especializado G. Medio OPI / Technician
Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant
OPI

Ayudante de Investigación / Research Assistant

**DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED
ASTROPHYSICS**

Jefe del Departamento / Head of Department:

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Jesús Martín-Pintado Martín
Prof. Santiago Arribas Mocoroa
Dr. Luis Colina Robledo
Dra. M^a Luisa Senent Díez
Dra. Almudena Alonso Herrero
Dr. Francisco Najarro de la Parra
Dr. Juan Ramón Pardo Carrión
Dra. Carmen Sánchez Contreras
Dra. Rosa Domínguez Gómez
Dr. Arturo Rodríguez Franco
Dr. Fabien Daniel
Dr. Fabrice Dayou
Dr. Alejandro García Bedregal
Dr. David Hurtado Bouza
Dr. Álvaro Labiano Ortega
Dra. Nuria Marcelino Lluch
Dr. Javier Rodríguez Zaurín
Dr. Eduardo Sánchez Suárez
Dr. Michael Taylor
Dña. Helena Massó González
D. Marcelino Agúndez Chico
Dña. Julia Alfonso Garzón
Dña. M^a Aranzazu Amo Baladrón
D. Tanio Díaz Santos
Dña. Izaskun Jiménez Serra
D. Daniel Miralles Caballero
D. Miguel Pereira Santaella
D. Javier Piqueras López
Dña. Belén Tercero Martínez
Dña. Lucie Vincent

Profesor de Investigación / Research Professor
Profesor de Investigación / Research Professor
Investigador Científico / Research Scientist
Investigador Científico / Research Scientist
Científica Titular / Tenured Scientist
Científico Titular / Research Scientist
Científico Titular / Research Scientist
Científico Titular / Research Scientist
Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Investigador Contratado / Postdoc Contract
Contratada a proyecto CAM / Project Contract-CAM
Becario Predoctoral-FPU / PhD Fellowship-FPU
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
Becario Predoctoral "MARIE CURIE" / PhD
Fellowship-FPI

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Alicia Fernández Clavero

Ayudante de Investigación / Research Assistant

**DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS /
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES**

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José A. Sánchez Gil

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Juana Bellanato Fontecha

Prof. José V. García Ramos

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. Luís Díaz Sol

Dra. Magna Santos Greve

Dra. Marina Molina Santos

Dra. Paz Sevilla Sierra

Dra. M^a Rosa López Ramírez

Dña. Raquel de Llanos Bravo

Dña. Elena del Puerto Nevado

D. Luca Guerrini

Dña. Irene Izquierdo Lorenzo

Dña. Zuzana Jurasekova

D. Rogelio Rodríguez Oliveros

Profesora de Investigación / Research Professor (ad Honorem)

Profesor de Investigación / Research Professor (until 6 June 2008)

Investigador Científico / Research Scientist

Investigador Científico / Research Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Investigador Contratado-I3P / Postdoc Contract-I3P

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Becaria Predoctoral-JAE-UA / PhD Fellowship-JAE-UA

Becario Predoctoral- JAE / PhD Fellowship- JAE

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship- JAE

Becaria Predoctoral-Marie Curie/ PhD Fellowship

Marie Curie

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Raquel Ambrona Sánchez

Dña. María Luisa López Gil

Dña. Ana Magro Carrillo

Auxiliar Administrativo / Administration Auxiliary

Ayudante de Investigación / Research Assistant

Contratado Técnico-I3P / Technician-I3P

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Dr. Fernando Ania García

Dra. Maria Esperanza Cagiao Escotado

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Victor Cruz Cañas

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Alejandro Sanz Parras

Dra. Carmen Arribas Arribas

D. Jaime Javier Hernández Rueda

D. Jon Otegui de la Fuente

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Dr. Marco Pieruccini

Dña. Marianella Hernández Santana

Profesor de Investigación Vinculado “ad honorem” / Adjoint Research Professor

Profesor de Investigación / Research Professor

Investigador Científico / Research Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Científico Titular / Tenured Scientist

Investigador Contratado -RyC / Postdoc Contract -RyC

Investigador Contratado -I3P / Postdoc Contract-I3P

Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE

Doctor Vinculado / Adjoint Researcher

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Becario Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

Becario Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (since 1 October 08)

Estancia Sabática / Sabbatical Grant

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate

Dña. Ana M. Montero Cuellar

Ayudante de Investigación / Research Assistant

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE MANAGEMENT OFFICE

Dña. Pilar Criado Escribano
Dña. M^a Teresa Burriel Barceló

Dña. Ana María García Arribas
Dña. M^a Carmen García Collado

Dña. Isabel Lombán Botello

Dña. Concepción Nieto Serrano

Gerente / Manager
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's [CFMAC] /
Technical Specialist OPI
Ayudante de Investigación / Research Assistant
Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado /
Civil Servant - Administration Auxiliary
Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo /
Auxiliary OAAA
Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática /
IT Technical Auxiliaries

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

ALMACÉN / WAREHOUSE

Dña. María Jesús Puado Villalba
Dña. María Luisa Virtud Jiménez

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant OPI
Ayudante de Laboratorio / Lab Assistant (until 25 November 2008)

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dña. Isabel Mendoza García

Dña. Pilar Arangüena Pernas

Dña. Flora Granizo

Dña. Isabel Delgado Oliva
Dña. Margarita Martínez Álvarez

D. Cristobal Pozo Molina

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's /
Technical Specialist OPI (until 22 May 2008)
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's /
Technical Specialist OPI
Técnico de Biblioteca y Documentación /
Library and Documentation Specialist
Titulado Técnico de los OPI's / Technical Graduate OPI
E. Administrativo de Organismos Autónomos /
Administrative OAAA
Ayudante de Biblioteca y Documentación /
Library and Documentation Assistant (until 10 January 2008)

CENTRALITA / SWITCHBOARD

Dña. Encarnación García-Alcañiz Fernández
Dña. María Paz Sánchez-Beato Dorado

Auxiliar Servicios Generales / General Services Auxiliary
Auxiliar Servicios Generales / General Services Auxiliary

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbas Utrillas

Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes /
Common Services Assistant
Ayudante Gestión y Servicios Comunes /
Common Services Assistant

INFORMÁTICA / IT

D. Jorge Álvarez Copo
D. Carlos Meneses Jiménez

I3P (Técnico Medio Área Téc. Mant.) / Technician I3P
Técnico Especialista de Grado Medio de OPI's /
Technical Specialist OPI

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

Dña. Belén Palero Fernández
D. David Fernández Rioja

D. José María Sanz Pastor

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant OPI
I3P (Técnico Activ. Téc. Mant. GP4) /
Technician I3P (until 27 January 2008)
Oficial de Activ. Técnicas y Profesionales /
Technical and Professional Activities Officer

PROYECTOS Y DELINEACIÓN / PROJECTS AND TECHNICAL DRAWING

D. Andrés de Frutos Gómez

Titulado Técnico Especializado / Technical Graduate

D. José Granados Valenzuela

Ayudante de Investigación / Research Assistant

PUBLICACIONES Y REPROGRAFÍA / PUBLICATIONS AND REPRODUCTIONS

D. Julián Gil Risco

Oficial Activ. Técnicas y Profesionales /

Technical and Professional Activities Officer

TALLER MECÁNICO / WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano

Ayudante de Investigación / Research Assistant

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco

Técnico Superior de Activ. Técnicas de Mant. y Profes. /

Technical and Professional Activities Technician

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravitación y Cosmología.
- Teoría de la Materia Condensada.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos.
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos computacionales en física gravitacional.
- Agujeros negros y análogos en materia condensada.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o Física teórica y matemática.
- o Métodos computacionales.

LABOR INVESTIGADORA

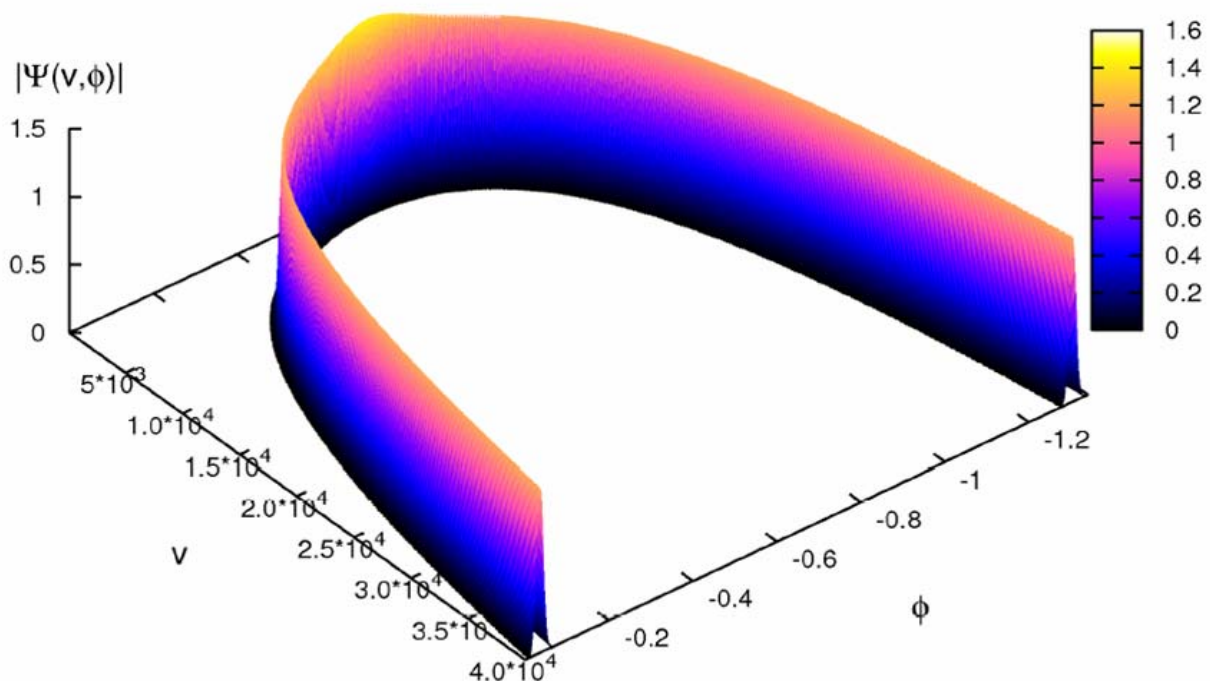
GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

Durante el año 2008 se ha proseguido la investigación en las líneas ya tradicionales del Grupo de Gravedad y Cosmología del Instituto de Estructura de la Materia, como son la cuantización de modelos cosmológicos de Relatividad General, la inclusión en estos modelos de campos con infinitos grados de libertad, correspondientes a inhomogeneidades, o el estudio de análogos de agujeros negros en Física de la Materia Condensada.

En lo referente a la cuantización de modelos cosmológicos obtenidos en Relatividad General por la imposición de simetrías, en primer lugar se ha completado el análisis de la cuantización convencional (de tipo Fock) en las cosmologías de Gowdy con ondas gravitatorias linealmente polarizadas. Estas cosmologías describen familias de soluciones a las ecuaciones de Einstein con secciones espaciales compactas y que contienen grados de libertad locales correspondientes a las inhomogeneidades asociadas a ondas gravitatorias. En trabajos anteriores, en los que la discusión se había centrado en el caso de la topología del tres-toro, habíamos demostrado que es posible alcanzar una teoría cuántica consistente para describir este sistema cosmológico a partir de técnicas propias de Teoría Cuántica de Campos en espacios curvos. Esta consistencia incluye la implementación de la dinámica del sistema (una vez fijado el gauge temporal convenientemente) mediante una transformación cuántica unitaria, compatible con la interpretación probabilística convencional de la Mecánica Cuántica. En dicha teoría cuántica, se adopta una representación de Fock para el campo escalar que contiene los grados de libertad locales asociados a las ondas gravitatorias. Esta cuantización es la primera descripción cuántica satisfactoria en la literatura de un modelo cosmológico con inhomogeneidades. Es más, la teoría cuántica construida es en realidad la única cuantización de Fock físicamente aceptable del sistema ya que, si se exige que la evolución y una simetría homogénea remanente sean implementadas como transformaciones unitarias, la cuantización de Fock adoptada resulta ser la única posible, salvo por equivalencias que no alteran los resultados físicos. Esta propiedad es realmente llamativa, y proporciona una enorme solidez a las conclusiones derivadas de la cuantización. Estos resultados se han complementado en 2008, demostrando de forma rigurosa y definitiva que la unicidad de la representación de Fock es válida para todas las topologías posibles en las cosmologías de Gowdy: la del tres-toro, la de la tres-esfera, y la del círculo por la dos-esfera. No existen precedentes en la literatura de teoremas de unicidad de este tipo para Teoría de Campos en espacios curvos con dependencia temporal.

Aún más, prosiguiendo con el estudio de estas cosmologías de Gowdy, hemos conseguido extender la cuantización al sistema sin fijación completa del gauge temporal y reemplazando las técnicas de cuantización de Teoría de Campos por las de Gravedad de Lazos. Recordemos que la Gravedad Cuántica de Lazos es un firme candidato para proporcionar una teoría cuántica no-perturbativa de la gravedad. Es un intento de cuantizar la Relatividad General de manera canónica y de forma que se preserve la independencia de estructuras de fondo. Su punto de partida es una formulación de la Relatividad General en términos de conexiones y tríadas densitizadas, introducida por Ashtekar. El papel fundamental que desempeñan las conexiones posibilita emplear técnicas de cuantización de lazos, usadas tradicionalmente en teorías de gauge. Para la Gravedad Cuántica de Lazos, el grupo de gauge puede identificarse con $SU(2)$. La teoría está sujeta a ligaduras que surgen como consecuencia de la invariancia gauge y la independencia de estructuras de fondo. Específicamente, esta independencia implica invariancia bajo

difeomorfismos espaciales y la presencia de una ligadura hamiltoniana. Una regularización del álgebra de Poisson de las conexiones y las tríadas conduce a un álgebra de holonomías y flujos, en donde las tríadas densitizadas se integran sobre superficies y las conexiones a lo largo de lados. Esta álgebra se representa mediante operadores que actúan sobre funciones de la conexión construidas a partir de las llamadas funciones de “spin network”, que vienen definidas por un grafo (colección de lados), una representación de $SU(2)$ en cada lado, y un “intertwiner” (para la composición de esas representaciones) en cada vértice. El programa de cuantización aún no está completo: es preciso imponer la ligadura hamiltoniana para determinar definitivamente el espacio de Hilbert de estados cuánticos. Entre los éxitos del programa, uno de los mayores es la aplicación a modelos en cosmología. Hasta ahora, los modelos estudiados eran muy simples, con homogeneidad y, por tanto, número finito de grados de libertad. En estos casos se había demostrado (por miembros de nuestro grupo) que la cuantización de lazos elimina la singularidad cosmológica de “big bang”. No obstante, como hemos dicho, los únicos modelos analizados en profundidad eran homogéneos e isótropos. Se había estudiado también hasta cierto grado de detalle algunos modelos homogéneos pero anisótropos. Por supuesto, realizar predicciones contrastables requiere un análisis de modelos más generales, en particular de modelos inhomogéneos. Con esta motivación abordamos durante 2008 la cuantización del modelo de Gowdy con polarización lineal y topología de tres-toro mediante técnicas de Gravedad de Lazos.



Simulación numérica de la resolución de la singularidad de "big bang" mediante un rebote cuántico: el "big bounce" (T. Pawłowski et al.).

Como hemos comentado parcialmente, este modelo de Gowdy puede interpretarse como una onda gravitatoria propagándose en un espacio-tiempo homogéneo, que corresponde a una cosmología anisótropa de tipo Bianchi I. Las soluciones clásicas presentan, de forma genérica, una singularidad inicial de tipo “big bang”. Para la descripción de los grados de libertad asociados a la onda gravitatoria (excepto su modo homogéneo, que puede absorberse en la geometría de Bianchi I), adoptamos la cuantización de tipo Fock que habíamos demostrado que existe y es única para el sistema. Para los grados de libertad geométricos que definen la cosmología de Bianchi I, empleamos una genuina cuantización de lazos. De esta forma pudimos demostrar que la inclusión de inhomogeneidades no influye en la desaparición de la singularidad cosmológica en la teoría cuántica, dentro del marco de la Gravedad de Lazos. La cuantización obtenida es la más completa hasta la fecha de un modelo con infinitos grados de libertad en Cosmología de Lazos.

El estudio riguroso de la cosmología de Bianchi I mediante métodos de lazos, necesario para abordar el análisis del sistema de Gowdy, permitió también obtener resultados interesantes en dicho modelo homogéneo, que había sido parcialmente analizado en la literatura. Se demostró así la autoadjunción de los operadores implicados en la cuantización, se determinaron correctamente los sectores de superselección, se obtuvo la solución exacta y completa de la ligadura hamiltoniana y se completó el programa de cuantización, determinando el espacio de Hilbert de estados físicos. En el marco de este modelo en vacío, se discutió también el problema de cómo definir la

noción de evolución en ausencia de un reloj proporcionado por un campo de materia. Se alcanzó una solución mediante la construcción de ciertas familias de observables parciales relacionados entre sí unitariamente, que se emplearon a continuación para estudiar la dinámica del sistema. Asimismo se probó, una vez más, que las singularidades cosmológicas del modelo desaparecen al llevar a cabo una cuantización de lazos.

Llevamos a cabo también investigaciones adicionales sobre la dinámica del universo y los efectos físicos de la Cosmología Cuántica de Lazos en el caso de espacio-tiempos homogéneos e isotrópos, caso en el que comprobamos la robustez del escenario de “big bounce” (rebote cuántico), proceso en el que un universo en contracción elude el colapso a una singularidad mediante una transición a un universo en expansión debido a las fuerzas repulsivas que se originan a escalas de densidad de energía próximas a la de Planck como consecuencia de que el espacio-tiempo es discreto. En particular, estudiamos la dinámica de un universo homogéneo e isotrópico con constante cosmológica, en el que el análisis de estados con comportamiento semiclásico a tiempos tardíos confirmó la presencia del “bounce”, que en este modelo conduce a una evolución del universo cuasi-periódica.

Otro frente de investigación en el que hemos trabajado está relacionado con teorías de gravedad modificada. La motivación surge a partir de la expansión acelerada observada en el universo, que es un problema teórico de gran trascendencia y a cuya comprensión se han dedicado muchos esfuerzos en los últimos años. Nuestra contribución se ha centrado en el estudio de teorías de gravedad modificada del tipo $f(R)$. Dado que modelos con correcciones infrarrojas tienden a estar dominados por inestabilidades, hemos tratado de encontrar modelos sin dichos problemas y esto, además, nos ha permitido encontrar una acción covariante de tipo $f(R)$ capaz de reproducir exactamente la dinámica de Cosmología Cuántica de Lazos en el caso de un universo homogéneo e isotrópico.

En otro orden de cosas, el estudio de funciones de correlación cuánticas en espacios curvos nos ha llevado a reconsiderar la derivación estándar del espectro de potencia del inflatón en el universo primitivo. Motivados por la manera de calcular los efectos Hawking, Gibbons-Hawking y Davies-Fulling-Unruh mediante funciones de correlación, hemos propuesto una redefinición del espectro de potencia que conduce a una resolución natural del “problema de la amplitud” durante la inflación: la amplitud del espectro de potencia del inflatón ya no viene determinada por la constante de Hubble, H , del período inflacionario, sino por el cuadrado de la masa efectiva del campo, lo que permite compatibilizar un valor elevado de H con una amplitud espectral suficientemente baja como para estar en acuerdo con las anisotropías observadas en el fondo cósmico de microondas.

En los temas de análogos de agujeros negros en física de la materia condensada, hemos examinado el papel que pueden desempeñar las relaciones de dispersión superluminales en la radiación a tiempos tardíos de los agujeros negros. En particular, hemos visto que el concepto de horizonte se hace dependiente de la frecuencia en estas circunstancias y que existe una frecuencia crítica a partir de la cual los modos no experimentan ningún horizonte. Tanto este hecho como la dependencia espectral de la gravedad de superficie pueden dar lugar a importantes modificaciones del espectro de radiación.

En lo referente al empleo de métodos computacionales en gravitación, hemos continuado el desarrollo de herramientas especializadas de álgebra computacional tensorial, y su aplicación a problemas de interés en Relatividad General. Estas herramientas se han diseñado como paquetes independientes para *Mathematica*, el sistema líder mundial en computación algebraica, y juntas forman el entorno *xAct*, (<http://metric.iem.csic.es/Martin-Garcia/xAct/> bajo la licencia GPL). Este año hemos mejorado las capacidades y la eficiencia del paquete central, llamado *xPerm*, encargado de la manipulación rápida de grupos finitos. Hemos publicado sus propiedades fundamentales, con comparaciones que muestran que nuestro código es varios órdenes de magnitud más rápido que otros sistemas, incluyendo los comerciales.

El sistema *xAct* se ha usado en cuatro problemas diferentes. Primero, hemos extendido nuestra base de datos de relaciones Riemann para incluir invariantes diferenciales del tensor de Riemann, aumentando el número de relaciones acumuladas por un factor 30, hasta más de $6 \cdot 10^5$. Esto permite la expansión rápida y única de cualquier invariante conteniendo hasta 12 derivadas de la métrica en términos de una base. Un resultado reciente de Coley et al. muestra que todos los espacio-tiempos pueden ser clasificados usando invariantes de Riemann excepto aquéllos de la clase Kundt degenerada (que es muy pequeña en comparación con el total). Una segunda aplicación ha sido la teoría de perturbaciones de alto orden, donde hemos construido el paquete *xPert*, que genera muy rápidamente las expresiones de las perturbaciones de alto orden de los tensores de curvatura. En tercer lugar, en el mismo área, hemos desarrollado una nueva técnica combinada para construir perturbaciones escalares e invariantes gauge, que describen la radiación gravitatoria. Finalmente, la cuarta aplicación ha sido el cálculo espinorial, donde hemos introducido el paquete *Spinors*, que se ha usado para mostrar que el número de derivadas necesarias para clasificar espacio-tiempos de tipo D en la clasificación de Karlhede es dos y no tres.

TRATAMIENTO CLÁSICO Y CUÁNTICO DE REDUCCIONES DE SIMETRÍA EN RELATIVIDAD GENERAL

Recientemente, se completó la formulación hamiltoniana de los modelos de Gowdy acoplados con materia -- específicamente, se consideraron campos escalares sin masa-- en sus tres topologías espaciales posibles (el 3-toro, la 3-asa y la 3-esfera) mediante el uso de técnicas geométricas modernas para el tratamiento de sistemas dinámicos. Los sistemas resultantes fueron interpretados en términos de campos escalares sin masa que evolucionan en espacio-tiempos de fondo fijos conformemente equivalentes a métricas sencillas como la plana en el caso del 3-toro o la métrica de Einstein en la esfera para las restantes topologías. Precisamente, el factor conforme dependiente del tiempo recoge en cada caso las singularidades presentes en la dinámica clásica, hecho que ha sido utilizado posteriormente para el análisis de la implementación unitaria de la dinámica en las versiones cuánticas de dichos modelos. En particular, hemos centrado nuestra atención en las topologías de la 3-asa y la 3-esfera, menos conocidas que la del 3-toro pero igualmente relevantes en el campo de la cosmología cuántica al presentar tanto singularidades iniciales como finales. Como ya se reconocieran en el caso del 3-toro, existen ciertas obstrucciones que impiden la definición de una evolución temporal cuántica unitaria cuando estos modelos son descritos en términos de las variables dinámicas que surgen de forma natural a partir de sus formulaciones hamiltonianas. La resolución de esta problemática pasa precisamente por realizar redefiniciones dependientes del tiempo de dichas variables dinámicas que involucren los factores conformes antes mencionados. Los métodos aplicados han permitido obtener, además, una demostración especialmente sencilla de la unicidad de la representación alcanzada para el álgebra de observables cuánticos. Finalmente, y como extensión de los resultados anteriores, se han formulado representaciones funcionales de Schrödinger para estos modelos, en los que los estados cuánticos de los sistemas quedan caracterizados por funcionales definidos sobre espacios de probabilidad adecuados, proporcionando un marco especialmente útil donde discutir cuestiones de interés físico como la existencia de estados semiclásicos en tales sistemas.

Aunque los resultados anteriores han sido alcanzados en el contexto restringido de los modelos cosmológicos de Gowdy, podría esperarse que las técnicas utilizadas en dichos sistemas fueran también aplicables en la identificación y resolución de los problemas de implementación unitaria de la dinámica en teorías cuánticas de campos en espacio-tiempos de fondo suficientemente simétricos. Como contraejemplo a los modelos de Gowdy, sin embargo, hemos demostrado la inexistencia de representaciones de Fock invariantes bajo el grupo de simetría de las ecuaciones de movimiento para campos escalares que evolucionan en métricas de fondo de tipo de Sitter en las que la evolución pueda describirse de forma unitaria. Este fallo de unitariedad es causado, básicamente, por la descripción en términos de osciladores dependientes del tiempo con frecuencias imaginarias.

ESTUDIO DE ENTROPÍA DE AGUJEROS NEGROS EN GRAVEDAD CUÁNTICA DE LAZOS

El trabajo realizado en este aspecto ha permitido avanzar de forma muy significativa en la comprensión de los problemas matemáticos que se plantean para entender el comportamiento de la entropía para agujeros negros dentro del contexto de la gravedad cuántica de lazos (GCL). En este sentido el problema más acuciante en la actualidad es averiguar si la cuantización efectiva de la entropía (y del área) observada para agujeros negros microscópicos en los trabajos clásicos de Corichi, Díaz Polo y Fernández Borja está presente también en agujeros negros macroscópicos. Si esta fuera el caso nos encontraríamos con una notable predicción de la GCL que enlazaría con los comportamientos esperados para la entropía derivados a partir de consideraciones muy generales por Bekenstein y Mukhanov.

Los resultados obtenidos han permitido confirmar los hallazgos iniciales sobre la cuantización de la entropía (obtenidos mediante el recurso a cálculos realizados mediante algoritmos de fuerza bruta). Desde el punto de vista técnico los avances logrados se basan en la resolución exacta de los problemas combinatorios involucrados en el cálculo de la entropía mediante el uso de técnicas de teoría de números y combinatoria. En el primer caso hemos podido plantear el problema de la caracterización precisa del espectro del operador de área mediante la utilización de la ecuación de Pell (una ecuación diofántica cuadrática) y una familia auxiliar de ecuaciones diofánticas lineales. De este modo se ha podido describir de forma explícita la degeneración del operador de área y obtener así uno de los elementos necesarios para la comprensión analítica del comportamiento de la entropía. En un segundo nivel se ha logrado utilizar estos resultados para obtener funciones generatrices para la entropía de los agujeros negros que pueden ser utilizadas para entender el comportamiento asintótico de la entropía (y ver así si la cuantización está presente en escalas macroscópicas). La obtención de una expresión analítica para este comportamiento asintótico es el problema abierto más importante en este campo. Aunque aún no hemos logrado completarlo de manera satisfactoria durante el último año se ha avanzado de manera notable en su comprensión. En particular se ha comprobado que la estructura analítica de las expresiones integrales que expresan la entropía como función del área presenta un interesante comportamiento que no excluye la presencia de la cuantización del área observada en los cálculos numéricos.

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL GRAFENO

Durante el año 2008 se ha continuado con el estudio de las propiedades electrónicas del grafeno (hoja de grafito de espesor atómico), que es en estos momentos uno de los materiales que mayor interés está despertando por sus posibles aplicaciones para dispositivos electrónicos. En particular, la investigación se ha centrado en el estudio de la vida media de las cuasipartículas a baja energía y su influencia en las propiedades de transporte, y en la estructura electrónica de materiales híbridos formados por la unión de nanotubos de carbono con el grafeno.

Dentro del primer apartado, se ha planteado la cuestión de cuál puede ser el límite superior de la vida media de los estados electrónicos en grafeno cerca del punto de neutralidad de carga, haciendo un análisis exhaustivo de todos los mecanismos de desintegración. La difusión de las cuasipartículas por fonones acústicos proporciona una cota superior para la vida media a muy baja energía. Este canal conduce de hecho a una razón de desintegración proporcional al cuadrado de la energía de las cuasipartículas, con un coeficiente que viene dado por la razón entre la velocidad del sonido y la velocidad de Fermi del sistema electrónico. Ha habido sin embargo resultados experimentales que han apuntado a la existencia de otras fuentes de difusión no relacionadas con fonones acústicos, a partir de la observación de desviaciones de la resistividad de un comportamiento puramente lineal a bajas temperaturas. Estas medidas experimentales han motivado la investigación de las excitaciones electrónicas de baja energía y los correspondientes canales de desintegración por debajo de la escala asociada a los fonones ópticos contenidos en el plano de grafeno. Así, se ha llegado a determinar la existencia de un fuerte acoplo entre los pares de electrón-hueco y las vibraciones normales al plano para una transferencia de momento grande conectando los dos puntos de Dirac no equivalentes del grafeno. Este efecto da lugar a una rama de estados híbridos con una energía por debajo del propio umbral de creación de pares electrón-hueco. Se ha podido demostrar que estos modos proporcionan el canal de difusión relevante de las cuasipartículas, conduciendo a una razón de desintegración proporcional al cubo de la energía por debajo de la escala de los fonones perpendiculares al plano (≈ 70 meV). Así mismo, se ha comprobado cómo la contribución de los modos híbridos a la desintegración de las cuasipartículas se reduce progresivamente conforme el nivel de Fermi se separa del punto de neutralidad de carga. Estos resultados han sido consistentes con las medidas de transporte llevadas a cabo en grafeno en función de la temperatura, donde se ha visto que el régimen lineal de la resistividad termina a una escala del orden de ~ 150 K. El análisis llevado a cabo ha determinado la existencia de una transición entre el régimen de muy baja energía de la razón de desintegración dominada por fonones acústicos y el régimen de desintegración amplificada por los estados híbridos de fonones normales y pares de electrón-hueco. Aparte de esto, los resultados obtenidos podrán también ser utilizados para estimar el recorrido libre medio de los portadores en muestras de grafeno sin impurezas, pudiendo garantizarse el transporte coherente en estas circunstancias sobre distancias ampliamente por encima de la micra, para una energía de las cuasipartículas del orden de unas pocas decenas de meV.

En el segundo apartado, se ha procedido al estudio de la estructura electrónica de las uniones formadas por nanotubos de carbono y grafeno, utilizando tanto la diagonalización numérica de modelos de enlace fuerte como la teoría del continuo basada en fermiones de Dirac. Esta última proporciona en particular una descripción unificada de las diferentes redes de carbono con curvatura, que está siempre localizada en seis anillos de carbono heptagonales en torno de cada unión. Cuando estos defectos están espaciados regularmente, hemos encontrado que es posible curvar la red plana de carbono para conectarla a nanotubos *armchair* ($6n,6n$) o *zig-zag* ($6n,0$). Por otra parte, prestando atención a la densidad local de estados, se ha logrado demostrar que todas estas uniones se pueden clasificar en dos grupos diferentes, dependiendo del comportamiento a baja energía. Uno de los grupos, constituido por las uniones con los nanotubos *armchair* y los *zig-zag* ($6n,0$) cuando n es múltiplo de 3, se caracteriza por la presencia de un pico muy cercano al nivel de Fermi en la densidad de estados, que está ausente para el resto de uniones con nanotubos *zig-zag*. Se ha comprobado que, en general, la densidad local de estados tiende a estar suprimida para momentos angulares $l \neq 0$, con picos por encima y por debajo del nivel de Fermi que marcan el umbral para la propagación de nuevos estados a través de la unión. La existencia de un pico muy cerca del nivel de Fermi resulta ser el reflejo de estados cuasi-ligados de la ecuación de Dirac, que surgen como consecuencia directa del flujo magnético efectivo inducido por una configuración apropiada de los anillos heptagonales. Por otra parte, se ha estudiado la estructura de bandas de las hileras de uniones, viéndose que pueden ser clasificadas también en dos grupos dependiendo del comportamiento a baja energía. Así, las hileras de uniones con nanotubos *armchair* o *zig-zag* ($6n,0$) cuando n es múltiplo de 3 están caracterizadas por tener un conjunto de bandas planas, cuyo número crece con la longitud del nanotubo. Se ha encontrado que tales bandas tienen su origen en la existencia de estados confinados en los nanotubos, con muy poco solapamiento en la región entre las uniones, y que en la teoría del continuo corresponden a la formación de ondas estacionarias en las mencionadas geometrías de nanotubo. En general, se ha podido concluir que el comportamiento peculiar predicho para estos sistemas híbridos (localización y confinamiento de estados, bandas planas) abre buenas perspectivas en la investigación de dispositivos electrónicos con propiedades no convencionales, cuyo desarrollo puede estar determinado en último término por el progreso en el diseño de estas estructuras (fabricadas ya por la empresa Fujitsu) en el laboratorio.

2A.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estructura y reacciones con núcleos estables y exóticos.
- Estudios de estructura nuclear realizados mediante desintegración beta. Modos de desintegración y ruptura de estados nucleares.
- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad nucleónica. Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta. I+D en detectores y electrónica.
- Medidas de momentos magnéticos en núcleos exóticos usando haces de iones radiactivos.
- Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones nucleares con sistemas de pocos cuerpos.
- Sistemas fuertemente correlacionados y mesoscópicos.
- Física de la Materia Condensada no cristalina.
- Instrumentación avanzada.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Núcleos con halo.
- I+D para FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales y dinámicas de núcleos con halo.
- Dispersión de leptones por núcleos.
- Transiciones Gamow-Teller en Estructura Nuclear, Astrofísica y Física de Partículas.
- Desintegración beta simple y doble.
- Sistemas de tres cuerpos en el continuo, resonancias y distribuciones de energía.
- Procesos de captura radiativa de dos nucleones con interés astrofísico.
- Determinación de defasajes en reacciones nucleares con tres cuerpos.
- Modelos exactamente solubles.
- Cálculos de gran escala en sistemas de baja dimensión.
- Decoherencia y transiciones de fase cuánticas.
- Estructura y dinámica microscópica materia condensada desordenada.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para fuentes de neutrones.
- Algoritmos para visualización de datos masivos en espectroscopia neutrónica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o Coincidencias gamma-gamma, detección de partículas cargadas.
- o Tratamiento de reacciones nucleares. Detección en cinemática completa de todas las partículas o fragmentos, sus energías y distribuciones angulares para la reconstrucción del invariante de masas. Desarrollo propio del sistema experimental y de DAQ con más de cien parámetros.
- o Métodos de cálculo de campo medio autoconsistente.
- o Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas. Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.
- o Soluciones de ecuaciones no lineales acopladas.
- o Grupo de renormalización de la matriz densidad y diagonalizaciones de gran escala.
- o Dispersión de neutrones.
- o Técnicas calorimétricas.

LABOR INVESTIGADORA

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

Previamente hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados. En la memoria de 2003-2007 informábamos del estudio en cinemática completa de las tres alfas provenientes de niveles de ^{12}C poblados a partir

de la desintegración β^+ de ^{12}N y β^- de ^{12}B y del estudio de los niveles excitados de baja energía de ^9Be relevantes en el cálculo de la tasa de la reacción $^4\text{He}(\alpha n, \gamma)^9\text{Be}$ alternativa a la de fusión de triple alfa en escenario estelares ricos en neutrones. Continuando en la misma línea hemos estudiado la desintegración beta de ^{11}Li a estados excitados en ^{11}Be por encima de los umbrales de los canales $^6\text{He}+\alpha+n$ y $2\alpha+3n$ de emisión de partículas. Estos estudios recrean un proceso en miniatura de una multi-fragmentación. La información sobre estados en ^{11}Be por encima del umbral de emisión de partículas cargadas es escasa. Estudios previos de estos canales los describen como la ruptura de dos estados excitados a 10.5 y 18.2 MeV. El primer estado se desintegraría a través de un estado intermedio a 9.5 MeV en ^{10}Be mientras que el segundo se fragmentaría directamente en 3 y 5 partículas. Sin embargo, en nuestro trabajo proponemos que la desintegración del estado a 18.2 MeV, y parte de la del estado a 10.5 MeV, ocurre en un proceso secuencial a través de isótopos resonantes de He, reforzando la idea de una estructura de clúster subyacente en ^{11}Be (Nuc. Phys. A 2008). Un nuevo experimento se realizó en ISOLDE, CERN, en septiembre de 2007 para confirmar estos nuevos canales que involucran isótopos de helio. El sistema experimental se mejoró para aumentar la eficiencia de detección de partículas cargadas en coincidencia. De esta manera se pudieron medir cinco veces más sucesos en coincidencia que en la anterior toma de datos. Los nuevos datos confirman la presencia de canales que involucran la emisión secuencial a través de la resonancia ^7He . La reconstrucción de las trayectorias de las tres partículas involucradas nos ha permitido identificar un nuevo estado en ^{11}Be . Además estudiando las correlaciones angulares entre las partículas cargadas hemos podido determinar el espín y paridad del estado de 18.2 MeV así como del nuevo estado a 16 MeV de energía de excitación en ^{11}Be (Phys. Lett en preparación). También se ha demostrado que el análisis en cinemática completa nos permite determinar con fiabilidad el canal de emisión retardada de tritio (Eur. Phys. J. aceptado). Este trabajo constituye el tema de tesis de nuestro becario FPU Miguel Madurga, cuya redacción está ya muy avanzada.

Como complemento a estos trabajos hemos estudiado la reacción $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ cuyos canales a través de ^{12}C y ^9B nos dan información sobre estados no accesibles a la desintegración beta complementando la información sobre la estructura de estos núcleos. Este trabajo está basado en experimentos realizados en la línea de Física Nuclear instalada en el Tandetrón del CMAM. Realizamos dos tomas de datos en marzo de 2008. La metodología utilizada para separar la contribución de los distintos canales se resume en una publicación técnica (NIM A, enviado). El análisis está muy avanzado y constituye el tema de tesis del becario I3P-CSIC, Martín Alcorta.

Hemos iniciado una nueva línea de investigación en el CMAM coordinada por el Dr. Galaviz y dedicada al estudio de la nucleosíntesis de elementos pesados, mediante la realización de experimentos de captura radiativa de partículas alfa en núcleos pesados usando la técnica de la activación. Tras las primeras pruebas de viabilidad realizadas en 2008 con un haz de ^4He sobre un blanco de ^{197}Au . El éxito en la producción de los isótopos de talio de interés nos ha llevado a construir un montaje experimental dedicado a este tipo de investigaciones.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DE NÚCLEOS CON HALO

Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear de los últimos años ha sido el del halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad nucleónica (línea de goteo). Un estado de halo es básicamente un fenómeno umbral que resulta de la presencia de estados ligados próximos al continuo. La combinación de una energía de enlace pequeña junto con el corto alcance de las fuerzas nucleares permite al nucleón (ó clúster de nucleones) alejarse y tener una probabilidad no despreciable a distancias mucho mayores que el radio nuclear normal ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2 \text{ fm}$).

Nos propusimos hacer un estudio experimental y teórico, de la dispersión de los núcleos con halo a energías próximas a la barrera coulombiana. Nuestro objetivo final es determinar el efecto de polarizabilidad dipolar, que consiste en la distorsión que sufren los núcleos durante la colisión debido a los campos eléctricos. Este efecto debe ser particularmente grande en núcleos con halo y se debe manifestar como una reducción de la sección eficaz elástica a ángulos grandes. Este proyecto se lleva a cabo en colaboración con grupos de las Universidades de Sevilla y Huelva con los que tenemos unidades asociadas. Primero estudiamos ^6He (véase la memoria de 2006) y este verano hemos medido ^{11}Li en TRIUMF (Canadá).

En el Cyclotron Research Center (CRC) de Louvain-la-Neuve (Bélgica) estudiamos el comportamiento de la sección eficaz elástica de ^6He sobre ^{208}Pb a ángulos grandes para energías entorno a la barrera Coulombiana (PH189 y PH215). El estudio realizado a energías por debajo, próximas y por encima de la barrera nos ha permitido comprobar la validez del modelo óptico para los núcleos con halo, y determinar los aspectos fundamentales de los potenciales que deben utilizarse para estos núcleos exóticos. Los resultados obtenidos indican que las secciones eficaces elásticas son parcialmente debidas a la polarizabilidad dipolar de ^6He en el campo coulombiano (Nucl. Phys. A 2008). Sobre este tema versa la tesis de Diego Escrib que se está redactando en el momento actual. Nuestro estudiante de tesis Mario Cubero analiza los datos de ^{11}Li . Una versión para el público del experimento realizado y del grupo de trabajo aparece en la página web de TRIUMF: <http://www.triumf.info/?headline=172>.

ESPECTROSCOPIA DE ESTADOS ISOMÉRICOS ALREDEDOR DE ^{132}Sn

Durante el proyecto RISING con haces parados en el GSI (Darmstadt, Alemania) en 2006 participamos activamente en un número de experimentos dedicados a la búsqueda de estados isoméricos en núcleos exóticos ricos y pobres en neutrones producidos en reacciones de fragmentación a energías relativistas. En particular, hemos sido responsables de un experimento usando la fragmentación de un haz de ^{136}Xe para estudiar isótopos ricos de neutrones cerca del núcleo doblemente mágico ^{132}Sn . La “highlight” de este trabajo ha sido la primera observación de la desintegración de un estado isomérico en el núcleo con $N=82$ ^{130}Cd punto de espera del proceso r (Phys. Rev. Lett. 2007). El análisis de la nueva información obtenida con respecto a los isótopos par-par del Cadmio $^{126,128,130}\text{Cd}$ así como ^{131}In (Phys. Rev. C Rapid 2009 y Phys. Lett. B 2009) ha sido el tema del trabajo de tesis de Lucia Cáceres que ha sido defendido en octubre de 2008 en la Universidad Autónoma de Madrid.

MEDIDAS DE MOMENTOS MAGNÉTICOS USANDO LAS TÉCNICAS DE LOS CAMPOS TRANSITORIOS

Las medidas de momentos magnéticos de estados excitados son de alto interés dado que dan información directa sobre la estructura de los estados bajo estudio, en particular su función de onda, y por eso permiten pruebas muy sensitivas de distintos cálculos teóricos. En el caso de que la vida media del estado de interés sea muy corta, en el rango de picosegundos, hay que aplicar campos transitorios fuertes para inducir efectos medibles durante un periodo de interacción muy corto entre el momento magnético y el campo. Mientras que hasta ahora estas técnicas de campos magnéticos estaban bien establecidas con haces de iones estables, muy recientemente han sido realizados los primeros experimentos con haces radiactivos a baja (haces del tipo ISOL) y alta (fragmentación) energías. En 2008 hemos sido responsables de una medida de momentos magnéticos en ^{72}Zn en GANIL (Caen, Francia) y hemos participado en dos experimentos mas realizados en MSU (EEUU). Además hemos preparado dos propuestas experimentales para medidas de momentos magnéticos en REX-ISOLDE que han sido aprobadas en noviembre de 2008. De momento nuestra estudiante de doctorado Jennifer Walker está analizando datos obtenidos en un experimento usando cuatro detectores del tipo Cluster (un total de 28 cristales de Gd) con la meta de determinar momentos magnéticos en los isótopos estables del Sn en el GSI. Esta actividad la vamos a extender en 2009 con un nuevo tiempo de haz ya aprobado.

I+D EN DETECTORES PARA FÍSICA NUCLEAR EXPERIMENTAL

Se han seguido dos líneas de trabajo independientes aunque relacionadas: la primera, ligada al proyecto EURONS (EU Contract nº 506065) consiste en el diseño y realización de un telescopio formado por dos capas, la primera ultra fina y la segunda gruesa, para la detección y separación en masa de partículas cargadas ligeras. La lectura se realiza con una electrónica multiplexada que nos permite en un módulo VME tratar y analizar 512 canales del telescopio simultáneamente. La segunda línea de trabajo (FPA2007-62170), enmarcada dentro de la colaboración FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), consiste en la construcción y testado de un centellador compuesto por dos cristales (Phoswich) de 3cm $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ + 5cm $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$. También, se han realizado simulaciones del comportamiento de dicho Phoswich. El objetivo ha sido separar e identificar los pulsos de cada cristal individual del Phoswich, lo cual hemos conseguido con éxito. La puesta a punto y caracterización del detector Phoswich ha constituido el trabajo de fin de carrera de Vincent Gugliemina, quien realizó una estancia con nosotros de seis meses. El trabajo fue presentado en la Escuela Superior de Ingenieros Superiores de Madrid el pasado 17 de noviembre de 2008.

TRANSICIONES DE FORMA NUCLEAR ESTUDIADAS MEDIANTE MÉTODOS AUTOCONSISTENTES

El estado fundamental del núcleo se caracteriza por diferentes configuraciones de equilibrio que corresponden a diversas formas geométricas. El estudio de estas formas de equilibrio así como de sus posibles transiciones ha sido objeto de numerosos estudios tanto teóricos como experimentales. En el contexto de los modelos algebraicos, de los cuales el Modelo de Bosones Interactuantes es el máximo exponente en Física Nuclear, las diferentes formas nucleares están asociadas a simetrías dinámicas que proporcionan una muy potente herramienta para describir las propiedades nucleares, ya que conducen a modelos exactamente solubles con soluciones analíticas. Las transiciones de fase (forma) corresponderían a la ruptura de estas simetrías que ocurren al variar el número de nucleones en el núcleo. Iachello introdujo hace algunos años una serie de simetrías críticas puntuales denominadas $E(5)$ y $X(5)$ que proporcionan predicciones sin prácticamente parámetros para energías de excitación y transiciones entre ellas en los núcleos en los que se produce el cambio de fase. $E(5)$ corresponde a la transición de esférico a gamma inestable mientras que $X(5)$ corresponde a la transición entre esférico y deformación con simetría axial. Estas simetrías fueron obtenidas en el contexto del hamiltoniano colectivo de Bohr bajo ciertas aproximaciones. En

concreto, el potencial en la coordenada beta es aproximado por un pozo cuadrado mientras que el potencial en gamma es aproximado por una constante en el caso E(5) o por un potencial cuadrático en el caso X(5). Evidencias empíricas de estas simetrías se han encontrado en ^{134}Ba para E(5) y en ^{152}Sm para X(5). En este trabajo se investigan las transiciones de forma desde un punto de vista microscópico, utilizando interacciones efectivas realistas de alto poder predictivo. Estudiamos si las suposiciones hechas para llegar a las simetrías E(5) y X(5) tienen justificación a nivel microscópico. Para ello estudiamos varias cadenas isotópicas en las que se ha predicho la existencia de candidatos a tales simetrías. Se han obtenido resultados para superficies de energía en cálculos autoconsistentes de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme (SLy4) y de Gogny (D1S) y con correlaciones de apareamiento. El papel desempeñado por la triaxialidad es también estudiado y se comparan estos resultados con los obtenidos mediante métodos de campo medio relativistas.

HIPÓTESIS DE DOMINANCIA DE UN ÚNICO ESTADO EN LA DESINTEGRACIÓN DOBLE BETA CON NEUTRINOS

La hipótesis de dominancia de un único estado (SSD) establece que en aquellas desintegraciones doble beta con emisión de dos neutrinos (2nbb) en las que el estado fundamental del núcleo intermedio impar-impar tiene un espín (paridad) $1(+)$, y puede por tanto ser alcanzado mediante una transición de Gamow-Teller a partir del núcleo par-par, que la transición a través de este estado daría cuenta de la mayor parte del elemento de matriz 2nbb. Si esta hipótesis es confirmada, las vidas medias de desintegraciones 2nbb podrían ser determinadas a partir de la desintegración beta sencilla y de la captura electrónica, experimentos que son mucho más fáciles de realizar que los de doble desintegración beta. En el aspecto teórico, la validación de la hipótesis SSD para las transiciones doble beta del estado fundamental del emisor al estado fundamental del núcleo final supondría una simplificación drástica del esfuerzo teórico necesario, porque sería suficiente conocer la función de onda del estado $1(+)$ más bajo del núcleo intermedio. Utilizando un formalismo basado en la aproximación QRPA que utiliza como base el campo autoconsistente obtenido mediante un cálculo de Skyrme Hartree-Fock con correlaciones de apareamiento y fuerzas separables de tipo espín-isospín, se han calculado las distribuciones de Gamow Teller para las dos ramas beta sencillas y los elementos de matriz para 2nbb en ^{100}Mo y ^{116}Cd , dos núcleos $1(+)$. Con estos resultados se ha evaluado el alcance de la hipótesis SSD o bien una hipótesis menos estricta que involucra no un único estado, sino un conjunto de estados a baja energía de excitación. Finalmente se generaliza el estudio incluyendo todos los emisores 2nbb que han sido observados. Los resultados obtenidos indican que no hay evidencias claras de la hipótesis SSD.

FUNCIONES DE ONDA DEL CONTINUO EN SISTEMAS DE TRES CUERPOS: RESONANCIAS, MODOS DE DESINTEGRACIÓN Y REACCIONES.

El método de la expansión adiabática en armónicos hiperesféricos ha sido desarrollado en los últimos años por miembros de este grupo en estrecha colaboración con el grupo de Física Nuclear de la Universidad de Aarhus (Dinamarca). El objetivo inicial era estudiar los núcleos con halo de dos neutrones, tanto su estructura como reacciones de fragmentación a alta energía. Posteriormente, combinándolo con el método de rotación compleja, el mismo procedimiento se puede emplear para estudiar estados resonantes en sistemas de tres cuerpos. Esto permite investigar también los estados excitados no ligados de los núcleos con halo, su estructura y sus procesos de desintegración. El comportamiento asintótico de la función de onda contiene la información sobre el tipo de desintegración, secuencial o directo, y en particular la probabilidad que cada uno de estos procesos de desintegración tiene. Por otra parte, la aplicación de estos métodos no se limita obviamente a núcleos con halo, sino es que es aplicable a cualquier sistema físico (moléculas, átomos, núcleos...) que formen un sistema de tres cuerpos. Así, hemos investigado no ya ^{11}Li o ^6He , sino, entre otros, ^{17}Ne ($^{15}\text{O}+p+p$), ^5H ($^3\text{H}+n+n$), ^6Li ($\alpha+n+p$), ^6Be ($\alpha+p+p$), ^{12}Be ($^{10}\text{Be}+n+n$) o los estados excitados del ^{12}C que se pueden tratar como un sistema formado por tres partículas α .

De forma general, el objetivo principal de nuestro trabajo ha sido el seguir avanzando en el desarrollo de las técnicas para el estudio de sistemas de tres cuerpos y explotar sus posibilidades en diversos campos de la Física Nuclear, profundizando en el estudio de sistemas de tres cuerpos en los que interviene la interacción coulombiana. Un tratamiento preciso de la función de onda a largas distancias es básico para entender cómo se desintegran las resonancias de núcleos como por ejemplo ^{12}C o ^9Be . También pretendemos estudiar reacciones nucleares a baja energía en las que intervienen este tipo de sistemas. En este punto distinguiremos dos tipos de reacciones, por un lado procesos de captura radiativa, que desempeñan un papel muy importante en procesos de nucleosíntesis estelar, y en particular en lo que se refiere al salto de los puntos de espera o “waiting points”, y por otro procesos específicamente nucleares, colisiones tanto entre un sistema de dos partículas y un blanco, como colisiones entre tres partículas, para las cuales, las particularidades de los potenciales adiabáticos asociados al método de expansión adiabática permiten distinguir de manera sencilla entre los distintos canales: elástico, inelástico, ruptura o “breakup”, y reconfiguración o “rearrangement”.

En particular, los trabajos más recientes se han centrado fundamentalmente en los aspectos siguientes: Por un lado hemos investigado los estados resonantes del ^{12}C y ^9Be , y la distribución de energía de sus constituyentes tras la desintegración de las correspondientes resonancias. También ha sido objeto de estudio la estructura del ^{12}Be ($^{10}\text{Be}+n+n$), cuyo resultado más relevante ha sido la obtención teórica de un estado 0^+ no conocido experimentalmente. Por último, hemos desarrollado las reglas de suma que han de satisfacer las intensidades de transición cuando el potencial entre las distintas partículas depende del momento angular, tanto en el potencial a dos cuerpos como en el potencial efectivo a tres cuerpos. Estas intensidades de transición son fundamentales para conocer las tasas de producción de los distintos elementos en los procesos de captura radiativa.

MODELOS EXACTAMENTE SOLUBLES

Durante el año 2008 realizamos avances significativos en el estudio, generalización y aplicaciones de los modelos de Richardson-Gaudin (RG) a diversos sistemas cuánticos fuertemente correlacionados. Extendimos el modelo de RG a las álgebras $\text{so}(6)$ y $\text{so}(8)$ de rangos 3 y 4 respectivamente. El modelo $\text{so}(6)$ describe sistemas de fermiones con 3 grados de libertad intrínsecos que se pueden asociar a los números cuánticos de color o a átomos fríos con tres estados hiperfinos. El Hamiltoniano de interacción es una pairing incolora. El modelo $\text{so}(8)$ representa un hamiltoniano de pairing protón-neutrón isoescalar e isovectorial o un sistema de átomos fríos de spin $3/2$ con interacciones monopulares y cuadrupolares.

Estudiamos fenómenos de polarización en sistemas fermiónicos de tres colores mediante el modelo RG $\text{so}(6)$ que se pueden simular con átomos fríos con 3 estados hiperfinos. Hallamos el diagrama de fases en función de la polarización y la intensidad de la interacción describiendo las regiones de estabilidad de la fase normal, la fase superfluida con brechas y la nueva fase superfluida sin brechas. Propusimos experimentos que pueden detectar estas fases. Extendimos cálculos previos de pairing protón-neutrón a sistemas de gran tamaño que constituyen un modelo de materia nuclear. Cuantificamos las correlaciones de 4 cuerpos que no pueden ser descritas por técnicas de campo medio y que dan lugar a condensados de alfas.

CÁLCULOS DE GRAN ESCALA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIÓN

Actualmente es posible la simulación experimental de modelos de sistemas cuánticos fuertemente correlacionados mediante sistemas de gases ultrafríos atrapados en redes ópticas artificiales. Disponemos de un código de grupo de renormalización de la matriz densidad muy eficaz para simular este tipo de modelos en una dimensión. Hemos modificado el código para poder tener en cuenta sistemas inhomogéneos, de gran relevancia debido al potencial de confinamiento de los átomos que aparece en la red óptica, y sistemas con varios grados de libertad por sitio, imprescindible para simular sistemas de gases ultrafríos atrapados en diferentes estados hiperfinos. En este contexto, hemos estudiado la fase de cristal de triones y cómo ésta se ve favorecida por el potencial de confinamiento en la red óptica. En sistemas de átomos con tres estados hiperfinos diferentes con interacciones atractivas aparecen estados ligados de tres átomos denominados triones. Cuando los átomos están confinados en la red óptica, los triones se repelen de forma efectiva y si la interacción es suficientemente intensa el potencial confinante estabiliza una fase cristalina con un trion localizado en un sitio de la red y rodeado de sitios vacíos.

DECOHERENCIA Y TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS

Durante el año 2008 nos centramos en el estudio de la vinculación entre la decoherencia que sufre un sistema pequeño y la presencia de fenómenos críticos en su entorno. Para ello, acoplamos un qubit a un baño grande modelado mediante un hamiltoniano bosónico de Lipkin. Este sistema se caracteriza por manifestar múltiples fenómenos críticos en escala cuántica, en particular transiciones de fase cuánticas de primer y segundo orden, en el estado fundamental y en ciertos estados excitados. Por el momento, nos hemos concentrado en las transiciones de fase de segundo orden en estados excitados. Mediante resolución numérica de hamiltonianos de gran escala (hasta 10.000 bosones) y la aplicación de algunas aproximaciones analíticas, hemos concluido que, cuando el acoplo entre el sistema y su entorno conduce a éste último a un punto crítico, la decoherencia inducida en el qubit es máxima y manifiesta un típico escalado de tamaño finito. Consideramos que este resultado es de gran importancia, pues permite identificar fenómenos críticos en sistemas grandes a partir del comportamiento de sistemas muy pequeños acoplados a ellos, y también identificar qué tipo de entornos deben evitarse si se desea mantener la coherencia cuántica del sistema central.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de atmósferas y plasmas.
- Fluidodinámica Molecular.
- Espectroscopía Láser.
- Física Molecular Teórica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Agregación molecular en chorros de gases.
- Coeficientes de transferencia de energía rotacional en colisiones moleculares.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos.
- Control Cuántico Molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía visible de emisión de plasmas.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- Espectroscopía Raman lineal.
- Chorros supersónicos de gases.
- Criogenia.
- Espectroscopía Raman Estimulada.
- Doble resonancia Raman-Raman.
- Métodos teóricos y computacionales.

LABOR INVESTIGADORA

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS Y PLASMAS

Esta línea de investigación contiene una parte experimental y otra teórica. La primera está enfocada en el estudio de sistemas de relevancia en la atmósfera terrestre, como partículas de hielo, aerosoles, iones y radicales, así como en hielos relativos a medios astrofísicos, tales como núcleos cometarios, granos interestelares y partículas de hielo en la envoltura de protoestrellas, y también en capas de hielo en planetas o satélites. La contribución teórica comprende dos áreas de trabajo; por una parte, cálculos químico-cuánticos en apoyo de los experimentos, incluyendo predicciones de propiedades moleculares, y en la segunda, tratamiento teórico de moléculas en superficies sometidas a agentes externos, que pueden también servir de modelo a los sistemas atmosféricos antes mencionados. En nuestra página web: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm> pueden encontrarse más detalles acerca de esta línea de investigación y los investigadores y personal de apoyo que participan en ella.

Física Molecular de Sistemas Atmosféricos y Astrofísicos

La parte experimental de esta sublínea de investigación fue iniciada alrededor del año 2000, centrada en el estudio espectroscópico de hidratos de ácido nítrico, constituyentes importantes de las llamadas nubes estratosféricas polares, en las que tienen lugar gran parte de los procesos fundamentales de destrucción de ozono estratosférico. El estudio incluía la preparación en el laboratorio de hielos de distintos hidratos de ácido nítrico y clorhídrico, así como la investigación de las interacciones entre las fases sólida y gaseosa de dichos sistemas. El trabajo experimental se complementaba con simulaciones teóricas de los mismos sistemas. Alrededor de 2006 empezamos una nueva línea dedicada al estudio de un tipo diferente de sistemas sólidos, que pudieran servir de modelo de

objetos astrofísicos. Desde esa fecha hemos trabajado sobre mezclas de hielos de agua, dióxido de carbono y metanol, que son tres de los más abundantes constituyentes de los núcleos de los cometas. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Al haber adquirido un nuevo criostato en el último año, hemos podido extender las medidas hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2008.

Hemos investigado mezclas de hielos de CO_2 y H_2O por medio de espectroscopía de infrarrojo de transmisión y de absorción-reflexión. Se prepararon las mezclas por deposición secuencial (primero agua y después CO_2) o co-deposición de los gases sobre un sustrato de Al a 90 K situado dentro de nuestra cámara. Se encontraron dos estructuras de CO_2 ligeramente diferentes en las mezclas. Por una parte, una forma cristalina, similar al CO_2 puro, que se evapora al calentar a 105 K; y por otra una especie no-cristalina de CO_2 aparentemente distorsionado que permanece inserta en el hielo de agua amorfa (ASW) después de calentar. Esta especie está caracterizada por desplazamientos de sus bandas en el espectro IR de 5 a 10 cm^{-1} (bandas ν_3 y ν_2 respectivamente) con respecto a CO_2 puro. A 140 K el hielo de agua sufre una transición de fase, y esto provoca una redistribución de las moléculas muestras co-depositadas, tal como se aprecia de sus espectros de IR. Hemos medido la superficie específica del ASW, comparándola con resultados previos. Por otra parte, hemos calculado también la geometría relajada del sólido de CO_2 y su espectro vibracional, comparando los resultados teóricos con los experimentales.

En otra serie de experimentos, hemos preparado mezclas de hielos de CO_2 y metanol en un rango de temperaturas de interés para cometas y otros objetos astrofísicos. Hemos realizado medidas de desorción programada y de espectros de transmisión de varios tipos de muestras. De nuevo aparecen dos estructuras de CO_2 , como en las mezclas con H_2O . Al calentar a 130 K, el CO_2 distorsionado sublima y permanece únicamente el CO_2 normal, que permanece atrapado en el hielo de metanol hasta su temperatura de sublimación, a 150 K. Las mezclas formadas por deposición secuencial (primero metanol, después CO_2) admiten hasta dos órdenes de magnitud más de dióxido de carbono que las mezclas codepositadas. Nuestros experimentos nos han permitido determinar la energía de desorción del CO_2 de hielo de metanol y la superficie específica de hielo amorfo de esta sustancia. Mientras que la energía de desorción del CO_2 sobre hielos de agua y metanol es similar, la superficie específica del metanol es mucho menor que la del ASW. Entre las conclusiones de mayor interés de estos estudios, que pueden encontrar aplicación en observaciones directas de núcleos cometarios, por ejemplo, merece destacarse que la interacción de las moléculas de CO_2 con agua y metanol es similar, pero al ser los hielos de metanol mucho menos porosos que los de agua, las moléculas de CO_2 se insertarían preferentemente en éstos últimos en mezclas que contengan ambas especies. Sin embargo, en procesos de deposición simultánea, el hielo de metanol podría albergar mucha mayor concentración de CO_2 que el ASW. El CO_2 no podría penetrar en hielos cristalinos de ninguna de las dos especies.

Estos resultados se han publicado en dos artículos en 2008 (mezclas $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$) y uno que aparecerá en 2009 ($\text{CO}_2/\text{CH}_3\text{OH}$) en *Astrophysical Journal*.

Cinética de Plasmas Fríos y Estudios de Interacciones Plasma-Superficies

Otra sub-línea de investigación de nuestro grupo está dedicada al estudio de plasmas de baja temperatura de interés atmosférico, que contienen especies tales como nitrógeno, oxígeno, hidrógeno, metano y otras. Este estudio en el laboratorio permite investigar especies y procesos relevantes en las capas altas de la atmósfera terrestre, de otros planetas y de algunos satélites, así como determinar datos de interés sobre reacciones ion-molécula, de gran importancia en procesos en el medio interestelar y protoestelar. La interpretación de los resultados experimentales se lleva a cabo utilizando diversos modelos cinéticos. Esta línea de investigación tiene también posibles aplicaciones en plasmas relacionados con la industria o la investigación nuclear. En los siguientes párrafos describimos en mayor detalle los resultados obtenidos durante el pasado año.

Hemos realizado estudios de plasmas fríos generados en descargas de cátodo hueco, habiéndose publicado los resultados correspondientes. La investigación de carácter más básico se ha dirigido al estudio de propiedades físicas y de cinética química de gases ionizados a baja presión. La investigación aplicada se ha realizado mediante colaboraciones con el Grupo de Interacción Plasma-Superficie del equipo de Fusión del CIEMAT, y con el Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y de Microtecnología (ISOM) de la Universidad Politécnica de Madrid.

Hemos analizado las diferentes distribuciones de energía de los iones generados en descargas de cátodo hueco a baja presión de gases atómicos y moleculares, puros o en mezclas. Las distribuciones medidas vienen determinadas en gran medida por la aceleración de los iones en la zona de la vaina entre el “glow” negativo y el cátodo. En general, presentan un pico estrecho centrado en energías próximas al potencial de ánodo, pero con características específicas para los diversos iones. El análisis de las distribuciones de energía ha proporcionado informaciones relevantes sobre procesos físico-químicos dentro de la región de descarga o en la vaina del plasma, y en algunos casos estas distribuciones han permitido estimar la abundancia relativa de iones con la misma relación masa/carga

pero diferente composición. Esta característica puede representar una importante herramienta para el análisis de plasmas complejos en el futuro (artículo: 10.1002/jms.1388, presentación oral: <http://hdl.handle.net/10261/10430>).

Por otra parte, hemos grabado y estudiado la emisión pulsada de plumas de plasma a través de un orificio transversal en el cátodo hueco de un reactor DC. Estas imágenes ilustran el comportamiento transitorio de estos fenómenos en condiciones especiales, cuando el diámetro del orificio es comparable al grosor de la vaina. Asimismo, dichas imágenes permiten extender las predicciones actuales sobre las distribuciones de iones en descargas de radiofrecuencias a través de aperturas pequeñas, y pueden escalarse hacia el campo de creciente interés de los microplasmas. El artículo completo y un video de estas plumas emergentes de plasmas pueden encontrarse en <http://hdl.handle.net/10261/8891>.

En colaboración con el CIEMAT, hemos investigado la eliminación de películas de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) a través de pequeñas rendijas que simulan estructuras “macro-brush” presentes en aparatos de fusión controlada, de interés para el ITER. Se generaron películas de 50-150 nm de espesor por medio de deposición química de vapor asistida por plasma (PEVCD) en descargas de CH₄/He sobre placas de Si y acero inoxidable. Las placas que contenían las películas depositadas se ordenaron formando estructuras tipo sándwich generando pequeñas rendijas (gaps), y se sometieron a procesos de erosión mediante exposición a plasmas de O₂/He y a oxidación térmica por O₂ y por una mezcla NO₂/N₂ en proporción 1:1. En los experimentos de erosión por plasma, las capas depositadas se eliminaron solamente de forma parcial en las superficies laterales interiores del gap. En los experimentos de oxidación térmica, las películas depositadas se eliminaron de forma homogénea y eficiente con oxígeno a 670 K y con la mezcla NO₂/N₂ a T > 570 K. Por otra parte, hemos investigado también el efecto de “getters” metálicos en la velocidad de eliminación de carbono en descargas luminiscentes de He/O₂. Debido a las restricciones impuestas para el uso de Be (propuesto para ITER) en experimentos de laboratorio, se utilizaron Li y Mg como getters (captadores) de oxígeno. El primero de estos elementos mostró también propiedades captadoras de hidrógeno. Las muestras de mezclas de C/metal se generaron introduciendo el elemento evaporador del metal en la cámara de deposición de la descarga luminiscente, que se mantiene a temperatura ambiente. La velocidad de crecimiento y eliminación de la película se controló in situ por medio de interferometría láser y balance de concentraciones a partir de datos de espectrometría de masas. Se han aplicado técnicas de análisis de superficies para la caracterización de las películas mixtas antes y después de la exposición al plasma oxidante. Hemos encontrado que era posible la eliminación total de capas metal/C en las condiciones utilizadas en estos plasmas. Se obtuvieron velocidades de eliminación similares a las medidas para películas de C puro, excepto en los casos de deposición por capas, en los que se observó una disminución de la velocidad de etching correspondiente a la eliminación de la capa metálica (DOI: 10.1088/1742-6596/100/6/062025).

En colaboración con el ISOM, hemos publicado un artículo de revisión sobre las características de plasmas que contienen nitrógeno, generados para producir nitruros y nitruros diluidos para aplicaciones en microelectrónica. Hemos preparado películas finas de nitruros de silicio (SiN) sobre muestras de silicio y sobre transistores de alta movilidad electrónica (HEMT) de AlGaIn/GaN por medio de la técnica de deposición química en fase vapor asistida por plasma. Los recubrimientos de SiN se han generado en reactores de descargas de RF, utilizando SiH₄ y NH₃ como precursores, en diferentes condiciones de potencia eléctrica y flujo de gases. Durante las deposiciones, se han caracterizado los plasmas por medio de espectrometría de masas cuadrupolar con resolución temporal. Se han estudiado las relaciones de eliminación de los gases precursores. Posteriormente se han determinado los índices de refracción y velocidades de crecimiento de las películas por elipsometría, y su composición por espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier. Hemos estudiado también las características eléctricas y de respuesta en frecuencia de estas películas en deposiciones sobre HEMT, por medio de corrientes pulsadas de DC y medidas de señales débiles de RF. Este tipo de deposiciones se utiliza usualmente para pasivar estos dispositivos en posibles procesos de colapsos de corriente. Hemos podido relacionar las características del plasma en diferentes condiciones de deposición con cambios subsecuentes en las propiedades de las películas.

Dinámica y Cinética de Reacciones Químicas

Hemos llevado a cabo nuevos estudios sobre la relación entre el estado de transición y las propiedades dinámicas en reacciones elementales. El estudio de la dependencia de la reactividad con el número cuántico de helicidad utilizando el formalismo de la probabilidad acumulativa de reacción ha demostrado ser de gran utilidad para poner de manifiesto las diferencias en las características del estado de transición en reacciones de tipo directo H+H₂ y F+H₂. En la actualidad estamos desarrollando una extensión del método al estudio de sistemas que dan lugar a la formación de complejos de reacción. La investigación en esta línea se ha llevado a cabo en colaboración con nuestros colegas de la Universidad Complutense, dentro del marco de nuestra “Unidad Asociada de Química Física”. En este mismo contexto, se han realizado medidas experimentales sobre el estado de transición en la fotodisociación del CH₃I utilizando la técnica de proyección de imágenes (“imaging”) y con resolución de femtosegundos.

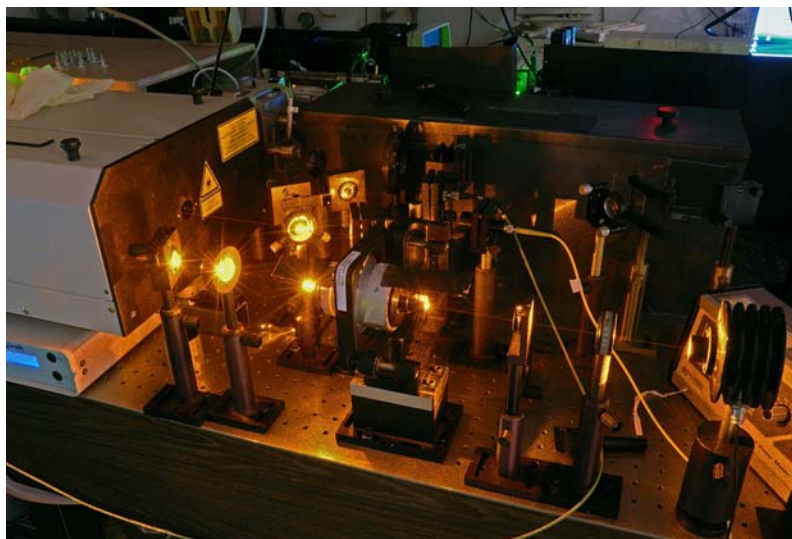
FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

La labor desarrollada en esta línea se centra en el estudio de los gases fuera del equilibrio en chorros supersónicos, incluyendo fenómenos como la agregación, la transferencia de energía por colisiones inelásticas, y la caracterización de campos de flujos.

En el apartado instrumental, se ha instalado un nuevo criogenerador por He en ciclo cerrado de más potencia (16 W a 20 K), lo que ha permitido trabajar a temperaturas más bajas (hasta 12 K) o con mayores presiones. Ello ha implicado rediseñar el sistema de calefacción y control térmico de la tobera. En el otro instrumento, se han instalado unos controladores de flujo másico de mayor caudal (6 l/min) que permiten preparar en línea mezclas precisas de gases para su expansión por toberas de rendija, que conllevan un mayor gasto que las toberas circulares empleadas hasta ahora. Asimismo, se ha montado un sistema para calentar la tobera hasta 200 °C, y un recipiente calefactado para poder expandir vapores de líquidos. Con ese montaje se han realizado satisfactoriamente las primeras pruebas de expansión de vapor de H₂O.

Hemos continuado trabajando en la agregación de especies de hidrógeno molecular. Se han registrado series de medidas de expansiones criogénicas de orto-D₂, empleando tobera de 50 micras y temperaturas de 35 a 60 K y presiones de 0,5 a 2 bares. Se han registrado las regiones espectrales de vibración (2993 cm⁻¹) y de la línea S₁(0) de vibración rotación (3166 cm⁻¹). Se han observado por vez primera los espectros Raman de los agregados pequeños (del dímero al pentámero) de D₂, así como de agregados mayores no resueltos en tamaño, hasta el sólido. También se han registrado los espectros de para-H₂ en expansiones criogénicas en la región de la línea S₁(0) de vibración-rotación a 4498 cm⁻¹, observándose nuevas transiciones del dímero (H₂)₂. Se ha estudiado la cinética de la agregación de para-H₂ en expansiones puras y de mezclas con He, confirmando el papel de las colisiones a tres cuerpos y determinando por primera vez los coeficientes cinéticos de formación del dímero y trímero.

En otra línea de trabajo se han realizado medidas de expansiones a temperatura ambiente de H₂, N₂ y sus mezclas 2H₂+N₂ y H₂+2N₂. Con ello se ha conseguido una caracterización bastante completa de los procesos de rotura de equilibrio térmico y difusivo en el flujo, tanto en el eje como en la dirección transversal, incluyendo las ondas de choque frontal y laterales. Por último, se han medido series de expansiones de para-H₂ desde varias toberas en rendija calentadas hasta 100 °C. Con estas medidas se pretende determinar los coeficientes cinéticos de transferencia nivel-a-nivel por colisiones inelásticas del para-H₂, ampliando el rango de temperaturas cinéticas desde 120 K, determinado anteriormente en nuestro laboratorio, hasta 270 K.



Laboratorio de Espectroscopía Láser

ESPECTROSCOPÍA LÁSER

Se han concluido las medidas de ensanchamiento colisional en el sistema C₂H₂ – H₂ a 143 K. Basándose en una superficie de potencial que considera monómeros rígidos, se han calculado los parámetros de ensanchamiento colisional de la rama Q de la vibración ν_2 del C₂H₂ en un intervalo comprendido entre 77 y 2000 K usando las aproximaciones de “clouse coupling” y “coupled-states”. La comparación de los datos calculados con los obtenidos experimentalmente a 143 K ha resultado satisfactoria.

En el sistema N_2-H_2 , las medidas de ensanchamiento colisional que hemos realizado mediante la técnica de espectroscopía Raman estimulada se han usado para determinar los parámetros del modelo Energy-Corrected Sudden, a partir de los cuales se han calculado valores de los parámetros de ensanchamiento en el intervalo comprendido entre 77 y 2000K, siendo de especial relevancia los valores a altas temperaturas para ser usados en los estudios diagnósticos de medios de combustión.

Se ha desarrollado la técnica, puesta a punto por nosotros en el año precedente, para la medida de tasas de transferencia de energía rotacional por colisiones en moléculas en fase gaseosa a baja densidad. Esta técnica se basa en dos procesos Raman estimulados encadenados. El primero de ellos, doblemente pulsado, puebla un solo nivel rotacional de un estado excitado seleccionado. El segundo proceso, cuasi continuo, prueba, a diferentes tiempos, la evolución de la población, tanto en el estado poblado ópticamente, como en otros estados no poblados en el proceso óptico a los que llega población por mecanismos colisionales. Por una parte, se ha puesto a punto un compresor de pulsos basado en un desplazador de Brillouin (Stimulated Brillouin Scatterin shifter) para reducir de 12 a 1 ns la anchura de uno de los pulsos de bombeo y así definir más precisamente el origen de tiempos. Por otra parte se ha sustituido la línea de retardo óptico por otra electrónica que permite mucha mayor flexibilidad para seguir la evolución temporal de las poblaciones.

En colaboración con otros grupos del departamento se ha llevado a cabo el análisis de formas de línea observadas en el espectro Raman estimulado de alta resolución de una expansión supersónica de N_2 , registrado en las proximidades de la tobera. El estudio de esta zona inicial de la expansión presenta un especial interés ya que la densidad, presión y temperatura presentan fuertes gradientes y la validez de los modelos de expansión isentrópica y de densidad fuera del eje no está garantizada en esta región. Asimismo, la forma de línea experimental tiene un aspecto muy anómalo, con picos dobles, mezcla de perfiles de Gauss y Lorentz superpuestos, y una dependencia extrema de la distancia a la tobera. Se ha elaborado un modelo muy detallado que ha permitido deducir que la mayor parte de las características anómalas del espectro se corresponden con la predicción del modelo estándar cuando se aplica a esta zona poco estudiada de la expansión. Se han identificado, parametrizado y en parte cuantificado los aspectos del modelo que requieren modificación.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Se ha continuado el estudio del uso de los estados cíclicos de una molécula diatómica sometida a un tren de pulsos láser intensos no resonantes para la obtención de alineamiento persistente en fase gas. Los estados cíclicos se caracterizan por ser estados propios del operador de evolución para un periodo del tren de pulsos $U(T,0)$. En determinadas circunstancias, caracterizadas en trabajos anteriores, algunos de estos paquetes de ondas rotacionales mantienen un alto alineamiento durante todo el tren de pulsos. Este alineamiento se convierte en orientación para moléculas polares en presencia de campos estáticos relativamente débiles.

Durante el presente año nos hemos centrado en las posibilidades de creación adiabática de estos estados mediante un proceso en el cual la intensidad de los pulsos individuales va aumentando lentamente a lo largo del tren entre cero y un valor máximo dado. El proceso es conceptualmente similar a la evolución adiabática de los estados propios de un hamiltoniano -independiente del tiempo- mediante la variación lenta un parámetro. En nuestro caso el hamiltoniano durante un pulso tiene una dependencia temporal fuertemente no adiabática respecto a la rotación molecular. Sin embargo, los estados cíclicos se obtienen como proyecciones en la base rotacional -para $t=t_0 \pm nT$, con n entero- de los estados propios del hamiltoniano de Floquet del sistema en el intervalo $[0,T]$. El objeto de nuestro estudio es determinar en qué condiciones la modificación adiabática de un parámetro en el hamiltoniano de Floquet produce una evolución adiabática de los estados cíclicos de forma que el estado cíclico a campo cero (igual a un estado propio del hamiltoniano rotacional a campo cero) es convertido en un estado cíclico altamente alineado (orientado). La complicación principal estriba en los cruces entre las cuasi-energías de los estados propios del operador de Floquet.

Nuestros resultados numéricos muestran que en un rango amplio de parámetros, accesible experimentalmente, es posible guiar esta evolución con rendimiento óptimo. También hemos demostrado que ciertos cruces pueden ser utilizados para convertir de forma controlada estados cíclicos orientados en antiorientados mediante el control de la envolvente de intensidad del tren de pulsos.

Se han realizado exploraciones preliminares sobre la aplicación de estas técnicas para el control de la orientación de moléculas dipolares atrapadas en redes ópticas, donde además del diseño del campo láser en cada nodo de la red (campo estacionario que mantiene la red más campo dependiente del tiempo que permite el control de la orientación) es preciso tener en cuenta las interacciones dipolo-dipolo entre las moléculas.

2A.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Formación y Evolución de Galaxias.
- Astrofísica Molecular e Infrarroja.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- AGNs y regiones nucleares de galaxias.
- Galaxias en interacción y con formación estelar.
- Galaxias a distancias cosmológicas.
- Desarrollos instrumentales.
- Espectroscopia molecular en el espacio.
- Química del medio interestelar y circunestelar galáctico y extragaláctico.
- Física Molecular Teórica aplicada a la Astrofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o Espectroscopia óptica e infrarroja de campo integral.
- o Imagen óptica e infrarroja.
- o Satélites científicos y telescopios.
- o Física Molecular Teórica.
- o Métodos computacionales.
- o Cálculos ab initio de alto nivel.

LABOR INVESTIGADORA

Las labores investigadoras del grupo se centran en dos áreas bien diferenciadas pero complementarias. Por una parte, se participa en desarrollos instrumentales para grandes instalaciones astronómicas futuras como son el *James Webb Space Telescope (JWST)*, proyecto conjunto de las agencias espaciales americana (NASA), europea (ESA), y canadiense (CSA), y el *Extremely Large European Telescope (E-ELT)* del Observatorio Europeo del Sur. Por otra parte se continúan las investigaciones en el ámbito de la formación y evolución de galaxias, en particular del estudio multifrecuencia de las galaxias infrarrojas luminosas y ultraluminosas.

PARTICIPACIÓN EN DESARROLLOS INSTRUMENTALES

Durante el año 2008 se han comenzado los estudios de fase A del instrumento HARMONI para el telescopio extremadamente grande ELT (*Extremely Large Telescope*) de la ESO (*European Southern Observatory*). DAMIR (S. Arribas) participa en esta fase como miembro de un consorcio liderado por la Universidad de Oxford (Reino Unido) y financiado por ESO. En particular DAMIR participa con tres tipos de estudios: i) definición y diseño conceptual del sistema de calibración del instrumento, ii) estudio comparativo entre el comportamiento esperado de HARMONI y otros instrumentos futuros, con especial atención en los del JWST, y iii) desarrollo del caso científico.

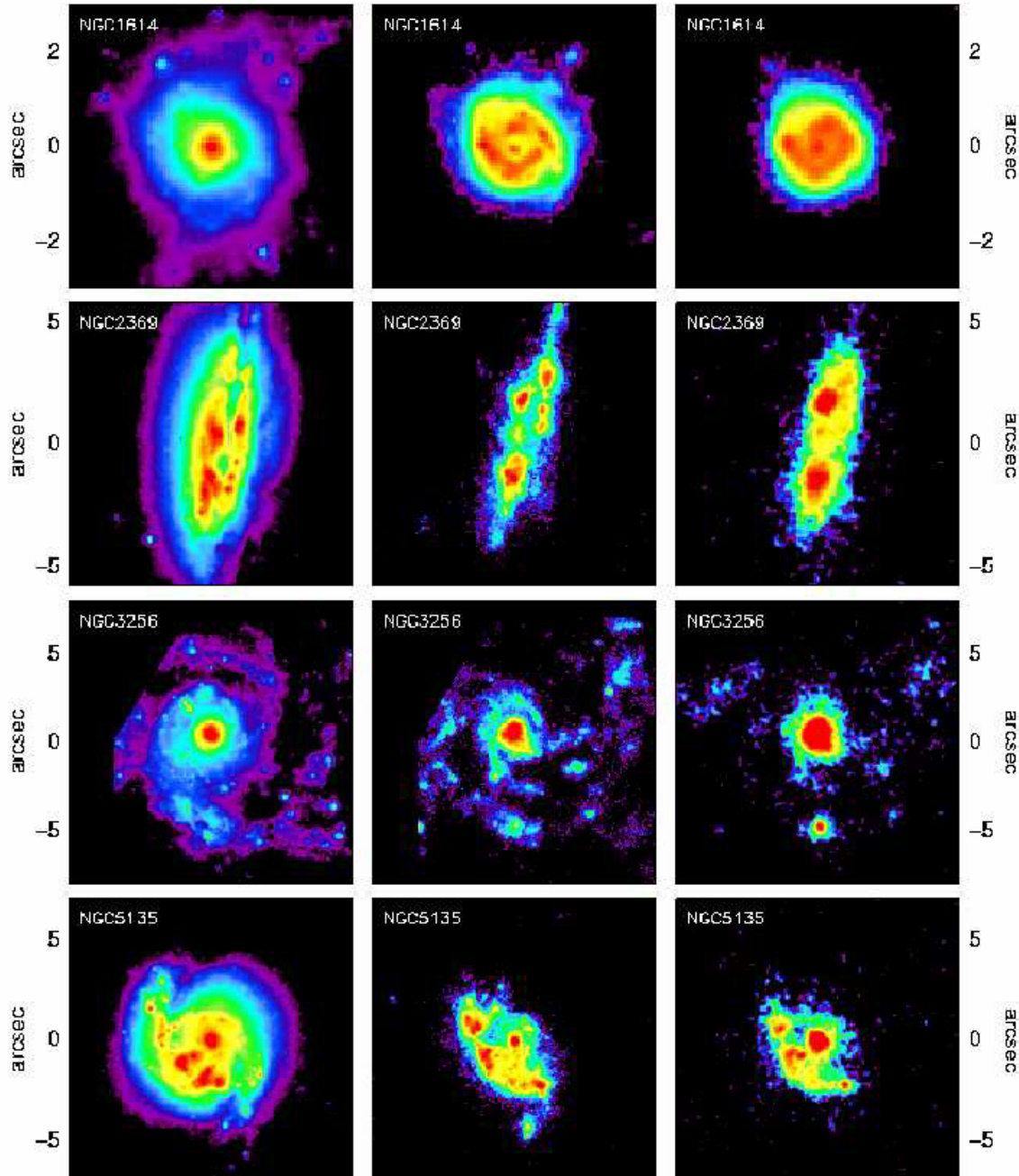
Se continúa la participación en los instrumentos MIRI (instrumento de infrarrojo medio) y NIRSpec (espectrógrafo en el infrarrojo cercano) para el telescopio *James Webb Space Telescope (JWST)*. Durante el año 2008 el equipo de MIRI en DAMIR (A. Labiano, A. Bedregal, L. Colina, A. Alonso Herrero) ha estado involucrado en las actividades del grupo de pruebas de dicho instrumento, habiendo participado en todas las fases de la verificación criogénica del modelo de ingeniería que han sido desarrolladas en el Rutherford Appleton Laboratory (UK). Con relación a la participación en NIRSpec, S. Arribas ha continuado su actividad en el contexto del NIST (NIRSpec Instrument Science Team).

LIRGs, ULIRGs Y AGNs EN EL UNIVERSO LOCAL

Se continúa el estudio de las propiedades físicas y cinemáticas de LIRGs y ULIRGs mediante el uso de técnicas de espectroscopia óptica de campo integral e imagen y espectros infrarrojos de alta resolución angular. Se han estudiado en detalle las propiedades de regiones de formación estelar en galaxias LIRG usando datos del HST y del telescopio Gemini en el infrarrojo térmico con el instrumento TReCS. Además de la publicación de un artículo sobre el tema en el *Astrophysical Journal* (parte de la tesis doctoral de Tanio Díaz Santos), el telescopio Gemini ha

realizado una nota de prensa en forma de "websplash" con los principales resultados y se ha publicado un artículo en la revista "Gemini Focus".

En colaboración con investigadores de la University of Arizona, A. Alonso Herrero ha trabajado en dos propuestas de observación con el telescopio infrarrojo espacial Spitzer de la NASA, para obtener mapeados espectrales en el infrarrojo cercano con IRS de una submuestra de 14 LIRGs locales. Las observaciones se han seguido obteniendo a lo largo de 2008. Miguel Pereira Santaella ha comenzado su tesis doctoral cuyo objetivo principal es el estudio de las propiedades en el infrarrojo medio y de rayos X de LIRGs locales con Spitzer y XMM. El análisis de los primeros datos se ha enviado como artículo al *Astrophysical Journal* y se han presentado en la VIII Reunión de la Sociedad Española de Astronomía.



Imágenes de las regiones centrales de Galaxias Luminosas Infrarrojas obtenidas mediante la cámara infrarroja (NICMOS) del Telescopio Espacial Hubble (HST) y la cámara de infrarrojo térmico T-ReCS en el telescopio Gemini. Las imágenes a 1.6 micras (izquierda) trazan la distribución de estrellas viejas en estas galaxias mientras que la emisión de Paschen_alpha (centro) y del polvo caliente a 8-10 micras (derecha) trazan estrellas formadas en los últimos diez millones de años. Los resultados completos se han publicado en Díaz-Santos et al. (2008) y en la página web del telescopio Gemini (<http://www.gemini.edu/node/288>).

Almudena Alonso ha sido investigadora principal con el telescopio de rayos X de la ESA XMM-Newton y ha obtenido 54ks en el Ciclo AO-8 para observar una submuestra de LIRGs, junto con las observaciones ya concedidas en el Ciclo AO-7. Las observaciones del Ciclo AO-9 se realizarán a lo largo de 2009.

Almudena Alonso ha obtenido como Investigadora Principal un "ESO/GTC large programme" con 20 noches de observación con el instrumento infrarrojo medio CanariCam para el Gran Telescopio de Canarias para hacer un "survey" en el infrarrojo medio de AGN locales. Este proyecto es una colaboración internacional en la que participan otros investigadores del DAMIR (L. Colina, T. Díaz Santos, M. Pereira), de la University of Florida, así como de universidades y centros de investigación de EEUU, Reino Unido, Alemania, Italia y México. Las primeras observaciones se obtendrán a partir del otoño de 2009.

Se han publicado los primeros resultados referentes al programa de espectroscopia óptica de campo integral del survey de galaxias (U)LIRGs obtenido con el instrumento VIMOS del VLT (S. Arribas, L. Colina, A. Alonso). Asimismo se ha completado el calibrado de los datos, y avanzado en un estudio referente a la estructura 2D de la componente estelar y de ionización de estos objetos (J. Rodríguez-Zaurin). Asimismo, y gracias a colaboraciones externas (A. Monreal-Ibero, ESO), se ha llevado a cabo un análisis sobre las fuentes de ionización en las regiones extranucleares de los objetos de la muestra. La muestra base de este estudio cubre de forma completa el rango de luminosidad y morfología de estas galaxias lo que permite estudiar sus características en función de estos parámetros.

Se ha observado una muestra de 17 galaxias con el instrumento SINFONI (Spectrograph for Integral Field Observations in the Near Infrared) del VLT (Very Large Telescope) en las bandas H y K. La resolución espectral del instrumento es de ~ 3000 en la banda H y ~ 4000 en la banda K. A. Bedregal, L. Colina, A. Alonso Herrero y S. Arribas continúan los estudios detallados, tanto morfológicos como cinemáticos de estos objetos, habiendo obtenido los primeros resultados para la galaxia NGC 5135. Javier Piqueras ha iniciado su tesis doctoral en la que tratará de realizar un estudio estadístico de las propiedades de las distintas componentes del gas interestelar en galaxias (U)LIRGs utilizando estos datos.

Finalmente, se prosigue el análisis (D. Miralles, L. Colina) de una muestra representativa de galaxias (U)LIRGs para la identificación de galaxias enanas de marea y su posterior caracterización en población estelar, tamaño y masa dinámica. Se piensa que los procesos de interacción de galaxias ricas en gas producen este tipo de galaxias pero se desconoce hasta la fecha su capacidad de supervivencia en los entornos de galaxias masivas.

LIRGs, ULIRGs Y AGNs A DISTANCIAS COSMOLÓGICAS

Almudena Alonso continúa sus trabajos como miembro del equipo científico del instrumento MIPS en el telescopio espacial Spitzer (NASA) sobre las propiedades de AGN a distancias cosmológicas. En particular se han estudiado las propiedades de las galaxias subyacentes y de los agujeros negros de AGN típicos a desplazamiento al rojo intermedios ($z=1$) en colaboración con investigadores de la University of Arizona, University of Oxford, y University of Durham, y se ha publicado en el *Astrophysical Journal*. Además Almudena Alonso ha participado en propuestas de observación con Spitzer para estudiar las propiedades de formación estelar y metalicidades de galaxias submilimétricas a alto z .

A. Alonso Herrero, S. Arribas and L. Colina participan en los grupos internacionales de trabajo dedicados a elaborar los programas científicos asociados al tiempo garantizado de los instrumentos NIRSpec y MIRI del JWST en el área genérica de formación y evolución de galaxias a distancias cosmológicas. En concreto, S. Arribas es el IP español del programa FP7 titulado ELIXIR, Early Universe Exploration with NIRSpec.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA APLICADA A SISTEMAS DE INTERÉS ASTROFÍSICO

Durante los próximos años, varias misiones espaciales o de instrumentación en tierra (HERSCHEL, ELT, ALMA) van a permitir describir las propiedades físico-químicas de las nubes moleculares con una sensibilidad sin precedentes, produciendo una multitud de líneas espectrales. La identificación, análisis e interpretación de estas líneas requiere un gran esfuerzo conjunto de astrofísicos y químico-físicos de modelización y de análisis de los datos experimentales, procesos colisionales y reacciones químicas.

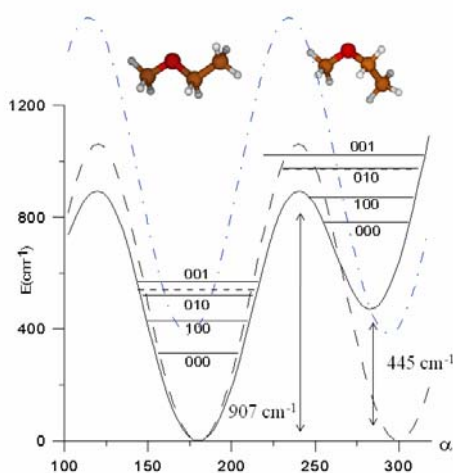
En los últimos años, se han detectado más de 150 especies moleculares distintas, que van desde las moléculas diatómicas más simples, a las más complejas como son los *fulerenos* o los *PAHs*. En esta búsqueda, la Física Molecular Teórica desempeña un papel fundamental ya que las fuentes astrofísicas representan cunas inagotables de especies moleculares nuevas que se forman o existen a muy bajas presiones y temperaturas y que se pueden

estudiar como moléculas aisladas. Permiten realizar cálculos de muy alto nivel para predecir con mucha precisión estructuras y propiedades moleculares en distintos estados excitados, así como estudiar su reactividad y procesos de formación. En el caso de especies interestelares difícilmente sintetizables en laboratorio, los datos teóricos son las únicas fuentes de información de las que se dispone. Cuando son sintetizables, los cálculos permiten entender las propiedades de los sistemas, correlacionarlas con la estructura molecular o verificar asignaciones.

Nuestra contribución a la preparación científica de las futuras misiones se lleva a cabo dentro de los entornos de proyectos de alcance europeo como “Molecular Universe”, en colaboración con los equipos que forman los proyectos AYA2005-00446 y AYA2008-00702. Estamos abordando mediante métodos teóricos tres campos de investigación, fundamentales para la Astrofísica Molecular: 1) Determinación de estructuras de nuevas especies de baja estabilidad, frecuencias de las transiciones y los coeficientes de excitación; 2) Determinación de las intensidades mediante coeficientes de excitación colisional; 3) Estudio de las reacciones químicas de formación. Muchos de nuestros resultados se recogen en las bases de datos para Astroquímica (Cologne Database for Molecular Spectroscopy - CDMS, BASECOL, UMIST) para su empleo por los astrofísicos.

a) Determinación de estructuras de nuevas especies de baja estabilidad, frecuencias de las transiciones y los coeficientes de excitación. Distinguimos entre moléculas no-rígidas (con varios conformeros) y semi-rígidas (que pueden presentar isomerismo), ya que requieren diferente metodología. El cálculo ab initio se emplea para determinar Superficies de Energía Potencial (PES) de distintos estados electrónicos y para predecir efectos rovibrónicos, Renner-Teller, Espín-Órbita,...etc. Para este fin, empleamos paquetes ab initio comerciales (MOLPRO, MOLCAS, GAUSSIAN) con cuyos equipos de programación colaboramos. Para determinar propiedades observables a partir de las PES, empleamos programas originales en Fortran que hemos desarrollado (FIT-ESPEC, ENEDIM). Durante estos últimos años, hemos hecho un esfuerzo muy grande para programar subrutinas que permitan ampliar el número de propiedades a determinar, y así abrir el acceso al estudio de sistemas cada vez más complejos.

Muchas especies astrofísicas no están bien caracterizadas experimentalmente debido a su inestabilidad. Este es el caso de las cadenas carbonadas (neutras o con carga eléctrica) tipo C_n , C_nX_y ($X = H, Si$) que son intermediarios de reacciones de formación de grandes moléculas orgánicas. Por otra parte, hay especies como el etil-metil-eter que se conocen muy bien, pero de las que existen incoherencias en las bases de datos para algunas propiedades concretas. Estas incoherencias se originan a la hora de asignar los espectros experimentales (ya que se emplean modelos teóricos efectivos relativamente simples) o se deben a que las distintas técnicas experimentales proporcionan datos no coincidentes.



Espectro FIR del etil-metil-eter (Senent et al., J. Chem. Phys.)

b) Determinación de intensidades a partir de coeficientes colisionales. La determinación de secciones eficaces y constantes de velocidad en colisiones no reactivas entre las moléculas más abundante y el H_2 (ortho y para), es fundamental para la simulación de las intensidades de las líneas y para la determinación de las abundancias moleculares en las fuentes astrofísicas. Los coeficientes se determinan a partir de PES de Van der Waals con cálculos ab initio, y los métodos de dinámica molecular CS e IOS implementados en el programa MOLSCAT. En colaboración con los Observatorios de Paris-Meudon y Grenoble y la Universidad de Túnez el Manar hemos

determinado coeficientes para SiO, SO, SO₂ y C₃ en colisión con He e H₂. Los datos se han enviado para su publicación a BASECOL.

c) Estudio de las reacciones químicas de formación. En Astroquímica, se suelen proponer modelos que contienen cadenas de reacciones, con el fin de explicar las propiedades químicas de las fuentes. Muchas de estos procesos no se pueden estudiar en el laboratorio y requieren metodología teórica. Recientemente, hemos iniciado estudios de reacciones que involucran muchos isómeros y estados electrónicos de cadenas carbonadas (C₄+H), así como procesos de importancia atmosférica (Mg⁺+O₂). Determinamos posibles canales de reacción, incluyendo varios estados excitados y estudiando intersecciones cónicas, transiciones prohibidas de espín, etc.

2A.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Físico-Química de los procesos de deposición y ablación.
- Espectroscopía sobre superficies y fotónica de plasmones superficiales.
- Bioespectroscopía.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Estudio de la ablación inducida por radiación láser infrarroja.
- Procesos fotoquímicos de deposición de fases nanométricas.
- Espectroscopía de plasma inducido por láser.
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SEVS) sobre nanoestructuras metálicas.
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico.
- Espectroscopías SEVS aplicadas a la detección de contaminantes.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula.
- Raman de nanotubos.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas.
- Nanoantenas: Raman y Fluorescencia.
- Propagación de polaritones-plasmones superficiales.
- Bioespectroscopía de correlación bidimensional.
- Bioespectroscopía de alimentos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía infrarroja.
- Espectroscopía Raman.
- Espectroscopía infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia Inducida por Láser (LIF).
- Espectroscopía Raman (normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía IR (normal y SEIR).
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía electrónica de transmisión y de barrido.
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica) y cálculos numéricos.

LABOR INVESTIGADORA

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN DE CORRELACIÓN BIDIMENSIONAL

En esta sublínea de investigación hemos utilizado la espectroscopía infrarroja y Raman para estudiar la estructura conformacional de un 25mero (1-25 nucleótidos) del HCV RNA. Este fragmento del genoma del virus de la hepatitis C puede interactuar con la proteína core para la formación de la nucleocápsida, y por tanto es de interés la determinación estructural de este oligonucleótido. Los espectros se obtuvieron realizando intercambio isotópico hidrógeno/deuterio medido en tiempo real con nuevos accesorios diseñados en nuestro laboratorio para posterior

análisis por espectroscopia de correlación bidimensional. Los principales resultados de esta investigación fueron los siguientes. (i) La forma-A que comprende la estructura ribofuranósica C3'-endo/anti es predominante; (ii) algunos nucleósidos de uridina y guanina adoptan las conformaciones C2'-endo/anti y C3'-endo/syn respectivamente que suelen ser características de secuencias en forma de bucle o lazo; (iii) y finalmente 6 de los 9 bases de guanina están asociadas en pares de bases formando un tallo. Estos resultados se interpretan como consistentes con la formación de una horquilla cuya estructura secundaria corresponde a la propuesta sobre la base de comparaciones filogenéticas con otros RNA virales.

ESTRUCTURA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS EN ALIMENTOS

En este último año del proyecto financiado por la Unión Europea (Proyecto FP6-506359) las actividades investigadoras se han dirigido a estudiar cambios estructurales en formulaciones de alimentos que contienen fibra AODF (fibra dietética antioxidante) de Fucus, así como a los análisis espectroscópicos de los componentes mayoritarios de esta AODF. Con este fin se desarrollaron nuevamente productos con fibra de Fucus, que fueron geles de surimi (3% AODF) y pescado picado (4% AODF) y sus correspondientes controles a humedad constante y concentración proteica constante. Con el fin de explicar algunas propiedades funcionales y sensoriales bajo un punto de vista espectroscópico, se midieron espectros Raman de dispersiones acuosas de fibra Fucus a humedad variable. Los resultados revelaron que la humedad local de la fibra Fucus, medida por la relación de intensidades $2937/1529\text{ cm}^{-1}$, era mayor que la correspondiente a las dispersiones acuosas de fibra al porcentaje promedio de humedad. Esto pudo explicar la menor capacidad de retención de agua de las formulaciones que contienen esta fibra. Por otra parte, las propiedades de los productos de surimi y pescado picado sugieren que algunos componentes de la fibra de Fucus actúan aumentando la textura y parámetros reológicos de los productos, puesto que ello no es atribuible a cambios de la estructura secundaria o terciaria de proteínas.

ESTUDIO DE LA ABLACIÓN INDUCIDA POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Estamos llevando a cabo estudios de los procesos de ablación en diferentes sistemas: films de tejidos biológicos (gelatinas) y láminas de Ni o Co en atmósfera de benceno. En colaboración con el grupo de Química Láser del Instituto de Química-Física Rocasolano hemos continuado con el estudio de la ablación de tejidos biológicos (gelatinas) mediante radiación láser IR en comparación con el proceso inducido por láser de exímeros a 266 y 355 nm. Mediante LIF ya habíamos detectado la formación de tirosina en el proceso de ablación infrarroja de estos tejidos y ahora hemos podido comprobar mediante OES que dicha emisión tiene lugar en gelatinas B255 y en Chitosano. Mediante esta técnica hemos iniciado un estudio de la dinámica de formación de este fotoproducto, habiéndose comprobado que, en ambos casos la tirosina es detectada hasta tiempos del orden de los milisegundos, sin embargo su detección a tiempos entre 0 y 100 μs desde el pulso de ablación láser no ha sido posible, lo que podría indicar bien un tiempo de incubación para la formación del fotoproducto o algún efecto de interacción de éste con la pluma de ablación.

En colaboración con el grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa) y con el fin de obtener nanoestructuras de metal/polímero realizamos experiencias de ablación mediante láser IR de láminas de Ni o Co en atmósfera de benceno. Durante este año hemos llevado a cabo un estudio más detallado mediante OES de las especies atómicas y moleculares provenientes de la ablación de las láminas metálicas y de la disociación simultánea de 1 y 5 Torr de benceno. Hemos estudiado también el “breakdown” inducido en 100 Torr de benceno en ausencia de láminas metálicas. En todos los casos se obtuvo la temperatura vibracional de la especie C_2 formada, así como de los átomos neutros de Co y Ni y de Ni^+ . Los resultados obtenidos sugieren que las especies ionizadas se forman más probablemente en la región interior de la pluma mientras que las especies atómicas y moleculares se producen en la región frontal de la pluma donde la densidad atómica es menor. Resultados preliminares indican que los depósitos formados contienen partículas metálicas embebidas en una matriz polimérica.

PROCESOS FOTOQUÍMICOS DE DEPOSICIÓN DE FASES NANOMÉTRICAS

También en colaboración con el grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa) hemos llevado a cabo un estudio de la disociación de mezclas de germano y trisilano con el fin de detectar la formación de SiGe en fase gaseosa en el proceso de pirólisis IR. Depósitos sólidos de este compuesto han sido detectados por diversas técnicas en los Laboratorios de Praga a partir de “breakdown” de germano y silano. Hemos realizado experimentos de disociación multifotónica IR para presiones bajas de los reactivos detectando la emisión mediante un sistema de monocromador y fotomultiplicador; para presiones más elevadas de los reactivos, la radiación emitida en experiencias de “breakdown” inducido por láser fue detectada por OES mediante una cámara ICCD. Aunque en fase gaseosa no ha sido posible detectar la formación de SiGe mediante los métodos descritos, ha podido demostrarse mediante espectroscopia Raman que esta especie se forma

en el depósito sólido. Simultáneamente con esta investigación hemos realizado un estudio espectroscópico de las especies emitidas en el breakdown del germano, estudio que no había sido realizado previamente.

ESPECTROSCOPIA DE PLASMA INDUCIDO POR LÁSER (LASER INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY, LIBS)



Plasma formado en la ruptura de N₂ inducida por láser IR.

Hemos reforzado la colaboración con el Prof. J .J. Camacho del Departamento de Físico-Química de la Universidad Autónoma de Madrid que iniciamos a principios de 2007, ampliando los temas de investigación que desarrollamos. Por una parte, continuamos con el estudio de los mecanismos de formación y propiedades espectroscópicas del “breakdown” inducido mediante nuestros láseres de CO₂ en moléculas gaseosas, y por otra hemos iniciado el estudio de la pluma de ablación producida por dichos láseres en blancos sólidos. En la primera línea hemos obtenido datos de los plasmas generados en atmósferas de helio y de oxígeno, habiendo sido publicados ya los resultados del segundo y estando en fase de redacción los correspondientes al primero. Respecto a la segunda línea hemos investigado las propiedades térmicas, dinámicas y espectroscópicas de la pluma producida mediante ablación láser en blancos de grafito realizando, además, un análisis con resolución espacial de las especies producidas en el proceso de ablación. Se han obtenido, y ya han sido publicados, datos relativos a la temperatura de excitación y grado de ionización del plasma a diversas distancias de la superficie del blanco, así como las características espectrales de las emisiones producidas en función de la presión de aire que rodea al blanco y de la irradiancia del láser de CO₂.

PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS

Una de las investigaciones básicas de nuestro grupo durante este año ha sido la preparación de superficies nanoestructuradas metálicas innovadoras y con altas prestaciones optoelectrónicas para ser aplicadas en técnicas espectroscópicas de intensificación basadas en localización de plasmones superficiales, SERS, SEIRA y SEF. Se ha dedicado especial atención a la fabricación de nanopartículas (NP) metálicas por presentar una mayor actividad. La fotorreducción inducida por radiólisis mediante haces láser es una técnica desarrollada en los últimos tiempos en nuestro laboratorio para el análisis in-situ de moléculas a nivel de trazas. En este sentido, se ha mejorado el método de preparación de nanopartículas de Ag por irradiación láser in situ sobre interfases sólido-líquido. Se ha llevado a cabo un estudio de las mejores condiciones de irradiación y concentración de metal para obtener nanopartículas con mejores rendimientos para las moléculas de interés empleadas en este periodo. Este método permite el análisis in situ de moléculas y materiales diversos sin necesidad de una extracción previa de los mismos. Esta técnica ha sido empleada para el análisis de pigmentos sobre tejidos naturales como la seda y la lana.

Asimismo, se ha avanzado en el desarrollo de métodos de preparación de nanopartículas “limpias” por estar desprovistas de impurezas o especies interferentes en los espectros vibracionales y/o electrónicos. Los métodos empleados han sido: a) reducción de plata mediante radiólisis inducida por radiación gamma, b) radiólisis inducida por haces electrónicos pulsados, y c) la producción de películas metálicas por deposición mediante láser pulsado (*Pulsed Laser Deposition*). Para llevar a cabo los dos primeros métodos fue imprescindible la colaboración con el grupo de la Dra. Armida Torreggiani del ISOF/CNR en Bolonia (Italia), ya que fueron necesarias las grandes instalaciones existentes en este instituto (“gamma cell” y acelerador lineal de partículas (LINAC)), para la nanofabricación de nanopartículas de Ag, Au y Cu. Este trabajo ha culminado con la publicación de un artículo en la revista *Colloids and Surfaces A* y la preparación de otro en la revista *Physical Chemistry Chemical Physics*.

Otra línea de interés en este apartado ha sido la fabricación de sistemas metálicos mixtos Ag/Au. Los métodos ensayados han sido dos: a) fabricación de aleaciones Ag/Au, por reducción simultánea de Ag y Au, y b) fabricación de partículas mixtas tipo “core/shell”. Estos sistemas se han caracterizado mediante resonancia de plasmones y microscopía (TEM, SEM y AFM), y SERS, lo que ha permitido obtener una valiosa información acerca de la distribución de los metales en las partículas resultantes, así como determinar su efectividad en SERS. También se ha puesto a punto una técnica para la fabricación de nanopartículas con forma estrellada o nanoestrellas. Para ello se ha empleado hidroxilamina como reductor de iones Ag^+ , en condiciones de pH neutro. Las nanopartículas resultantes presentan una resonancia plasmónica desplazada hacia el infrarrojo próximo, lo que hace su aplicación interesante en SEIRA (Surface-enhanced IR Absorption). Finalmente se está desarrollando un método para la fabricación de dímeros (NP-NP) de nanopartículas de plata mediante el uso de moléculas bifuncionales. La unión de estas NPs permitirá la creación de espacios interpartícula altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES METÁLICAS: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

Como en años precedentes, una parte importante del trabajo dentro de este proyecto se ha dedicado a la funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas, trabajo éste que ha corrido a cargo del doctorando Luca Guerrini. Este método permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras formadas, permitiendo así obtener superficies de altas prestaciones al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. En este sentido, el empleo de calixarenos funcionalizados con el grupo ditiocarbamato (DTC) en la parte inferior ha constituido un elemento innovador que nos ha permitido obtener sistemas metal/ensamblador con altas prestaciones en la detección de contaminantes del tipo de los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs). Estos sistemas combinan la alta capacidad de ensamblaje de los calixarenos con la alta afinidad del grupo DTC respecto a las superficies metálicas, aumentando el rendimiento de estos sistemas. Las superficies así obtenidas presentan una gran afinidad respecto a los contaminantes anteriores gracias a la creación de cavidades intramoleculares de gran selectividad. Durante este año se ha puesto a punto la técnica y se han obtenido importantes datos experimentales que han llevado a la determinación de los límites de detección de contaminantes y las constantes de afinidad de las moléculas receptoras frente a los analitos.

Otro grupo de moléculas empleadas en la funcionalización de superficies metálicas ha sido el de los viológenos. Estos compuestos interactúan fuertemente con el metal a través de la formación de pares iónicos o complejos de transferencia de carga entre el viológeno y el haluro previamente unido al metal. Los viológenos son compuestos con gran deficiencia electrónica, lo que facilita su ensamblaje con moléculas donadoras de electrones como son muchos contaminantes persistentes mediante un mecanismo de transferencia de carga. Los viológenos bifuncionales mejoran extraordinariamente las prestaciones de estas sustancias por actuar como creadores de espacios interpartícula con alta intensificación de campo electromagnético (*hot spots*, HS) de gran interés para la espectroscopía SERS.

Una importante contribución al estudio y formación de HS ha sido el empleo de diaminas alifáticas para inducir la unión NP-NP. La identificación de la banda de resonancia plasmónica de los dímeros formados ha permitido encontrar una correlación entre la longitud de la cadena alifática, la distancia interpartícula y la longitud de onda del máximo de absorción del plasmón longitudinal del dímero NP-NP. Estos ensambladores moleculares han permitido la fabricación de nanosensores moleculares al crear cavidades intermoleculares e interpartícula donde se pueden alojar los analitos. Además, la relativa sencillez estructural de estas diaminas ha facilitado enormemente la interpretación de los resultados.

INTERACCIÓN ENTRE NANOPARTÍCULA METÁLICA Y BIOMOLÉCULA

Dentro del ámbito de la funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas, una línea de gran interés desarrollada en el último año en nuestro grupo ha sido el diseño de sistemas mixtos metal-biomolécula para la fabricación de sistemas con altas prestaciones nanotecnológicas. En particular, la adsorción de oligopéptidos con NP metálicas da lugar a nanobiomateriales que pueden funcionar como bio-chips o biosensores. Sin embargo, a pesar de la importancia de estos materiales y la trascendencia de sus múltiples aplicaciones, el mecanismo de interacción entre péptido y metal no ha sido descrito de manera detallada y precisa hasta la fecha. En la mayor parte de las aplicaciones de sistemas mixtos péptido-metal se ha empleado nanopartículas de Au con propiedades plasmónicas. Sin embargo, nosotros hemos iniciado una línea de investigación conjuntamente con el grupo del Prof. M. M. Campos-Vallette de la Universidad de Chile para el estudio de la adsorción de péptidos con secuencia específica sobre NP de Ag. La fabricación de sistemas péptido-nanopartícula metálica no solamente presenta la ventaja de la funcionalización activa de las superficies metálicas, dando lugar a sistemas con aplicaciones en biosensores. Asimismo, la asociación del péptido a la nanopartícula puede tener importantes consecuencias sobre

las propiedades ópticas de las propias nanopartículas, al inducir una variación del patrón de interacción entre las mismas (distancia entre partículas y formación de agregados). La funcionalización con oligopéptidos de las nanopartículas preparadas según los métodos y los protocolos establecidos en nuestro laboratorio se ha llevado a cabo empleando oligopéptidos de diferente longitud de cadena y secuencia de aminoácidos. Se ha empleado fundamentalmente péptidos y oligopéptidos con alta afinidad por la superficie, que incluyen el aminoácido Arg, ya que este aminoácido interacciona fuertemente con metales, sobre todo si forma parte de la secuencia RGD (Arg-Gli-Asp) ó RGDS (Arg-Gli-Asp-Ser).

FUNCIONALIZACIÓN DE ELECTRODOS

La funcionalización de electrodos metálicos es una técnica que ha aportado más luz al análisis de la interacción de adsorbatos sobre metales al permitir un análisis de esta interacción a potenciales eléctricos variables. Este estudio pudo realizarse gracias al trabajo realizado por la Dra. María Rosa Ramírez López, que disfrutó de un contrato I3P, y la Dra. Lorena Roldán, de la Universidad de Tucumán en Argentina. La técnica se ha aplicado con éxito en el estudio de la reducción de viológenos, fundamentalmente lucigenina y diquat, encontrándose interesantes fenómenos que explican el mecanismo de interacción adsorbato-metal y de interacción intermolecular adsorbato-adsorbato al variar el potencial eléctrico aplicado. Por otra parte, se están ensayando nuevos métodos de funcionalización de electrodos metálicos basados en técnicas “layer-by-layer”, mediante las que se pretende también la inmovilización de dendrímeros y coloides metálicos sobre la superficie metálica del electrodo.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS (SEF)

Durante este último año se ha implantado con fuerza una nueva línea de investigación basada en la técnica SEF (*Surface-Enhanced Fluorescence*) con el comienzo de una nueva Tesis Doctoral por parte de Raquel de Llanos y la incorporación de la Prof. María Paz Sevilla de la Universidad Complutense de Madrid como Doctora Vinculada. La gran novedad del trabajo iniciado por estas investigadoras es la obtención de efecto SEF sobre NPs en suspensión. Este método ha permitido el estudio de la adsorción y agregación de fármacos, especialmente el fármaco antitumoral emodina, sobre NP. Asimismo, se ha encontrado que la funcionalización de nanopartículas metálicas es crucial en SEF, ya que la intensificación de la fluorescencia requiere de un cierto distanciamiento del fluoróforo respecto al metal. La aplicación conjunta de las espectroscopías SERS y SEF ha permitido obtener resultados muy satisfactorios en el caso del estudio de la interacción del fármaco antitumoral hipericina con proteínas transportadoras de suero sanguíneo como las LDL (Low-Density Lipoprotein) y Fosfatidilcolina, un integrante esencial de membranas plasmáticas en células eucariotas. Este estudio se está realizando en colaboración con el Departamento de Biofísica de la Universidad P. J. Safarik de Kosice (Eslovaquia) gracias a las estancias de Gejza Lajos en nuestro laboratorio y ha permitido obtener una valiosa información sobre el mecanismo biológico de la acción antitumoral fotoactiva del fármaco hipericina.

APLICACIÓN DE NANOSENSORES BASADOS EN SERS PARA LA DETECCIÓN DE FÁRMACOS EMPLEADOS EN DOPAJE DEPORTIVO

Se ha comenzado una línea de investigación nueva consistente en la aplicación de la técnica SERS en la caracterización de fármacos empleados en dopaje deportivo (FEDD) a cargo de la doctoranda Irene Izquierdo. Esta nueva línea ha sido inspirada por varias razones: ausencia de trabajos de caracterización vibracional de FEDDs, a pesar de su creciente importancia e impacto a nivel social y sobre la salud de las personas que las ingieren, así como la necesidad de desarrollo de sistemas de detección altamente sensibles y selectivos para la detección de FEDDs en fluidos fisiológicos (sangre, orina, lágrimas, saliva, etc.) por la creciente demanda impuesta por la nueva legislación (Ley Orgánica 7/2006, de 21 de noviembre). Se ha iniciado esta línea mediante la caracterización vibracional de una serie de FEDDs seleccionados por su frecuencia de uso y el efecto que producen. En particular los anabolizantes nandrolona y clenbuterol; la sustancia enmascarante de dopantes probenecid; y el beta-bloqueante propanolol. También se han obtenido los primeros espectros SERS de algunas de estas sustancias a bajas concentraciones y se han ensayado experimentos de funcionalización en nanopartículas metálicas para su detección selectiva.

TÉCNICAS LÁSER APLICADAS AL ESTUDIO Y A LA CONSERVACIÓN Y RESTAURACIÓN DE OBRAS DE ARTE Y MONUMENTOS

Se ha continuado con la aplicación de la espectroscopia SERS al análisis de los pigmentos polifenólicos flavonoides, extendiéndose este estudio a una serie de compuestos con diferentes sustituciones de grupos OH para encontrar una buena correlación estructura-espectros vibracionales, trabajo éste a cargo de la doctoranda Zuzana Jurasekova. Estas moléculas han sido empleadas tradicionalmente como pigmentos en tejidos históricos, además de presentar unas interesantes propiedades biológicas dado su carácter antioxidante. A pesar de su enorme

importancia son muy pocos los trabajos de caracterización de estas moléculas mediante espectroscopía vibracional, lo que se atribuye tanto a su alta fluorescencia como a su enorme inestabilidad. Recientemente se ha publicado un trabajo en colaboración con la Dra. Armida Torreggiani consistente en un estudio pormenorizado de la aplicación de la técnica Raman y la cromatografía HPLC al estudio de la degradación del falvonoide.

Se ha ensayado el método de fabricación de nanopartículas de Ag mediante fotorreducción in-situ para el estudio y detección de los pigmentos luteolina y apigenina en fibras naturales: seda y lana. Los resultados encontrados mediante el SERS se han comparado con los obtenidos por técnicas cromatográficas convencionales, lo que ha permitido deducir la localización de estos pigmentos en los materiales anteriores sin necesidad de aplicar métodos de extracción. Finalmente se han realizado cálculos de los modos vibracionales de estas moléculas para facilitar la asignación de los espectros Raman e IR de estas moléculas.

Se ha comenzado una línea de investigación nueva basada en la aplicación de espectroscopías SERS, SEIRA y SEF al estudio de pigmentos sintéticos contemporáneos, que está a cargo de la doctoranda Elena del Puerto. Los pigmentos analizados durante este año han sido la quinacridona, quinacridona quinona y derivados de estas moléculas. Dada su gran insolubilidad en medio acuoso, se han ensayado métodos para la dispersión de estos pigmentos basados en su encapsulación con calixarenos. Se han obtenido así los primeros espectros Raman de estos compuestos poniéndose las bases para su identificación en los medios dispersantes comerciales mediante los que normalmente se aplican.

Finalmente, en relación con el Patrimonio, se continúa con la aplicación de la espectroscopía Raman en la caracterización de materiales de construcción y la degradación de sulfatos por formación de compuestos minerales como la taumasita y la generación de carbonato cálcico, en sus diferentes formas, sobre electrodos metálicos, trabajo éste que se está llevando a cabo en colaboración con Sagrario Martínez Ramírez del Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja” del CSIC. El deterioro de morteros y hormigones por formación de taumasita es un tema de investigación de creciente actualidad e importancia, toda vez que el número de casos encontrados va en aumento. La espectroscopía Raman es una técnica que permite el seguimiento de esta degradación mediante el análisis de las bandas características de estos materiales. En este sentido se ha iniciado una nueva línea de investigación consistente en la aplicación de la técnica SERS al estudio de la formación de taumasita en suspensión acuosa que está ya dando interesantes resultados.

EXCITACIÓN DE RESONANCIAS PLASMÓNICAS EN NANOESTRUCTURAS METÁLICAS: INTENSIFICACIÓN SEF Y SERS

Se ha continuado la fructífera investigación teórica y numérica de la dispersión de luz y acoplamiento con resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas tipo nanoantena. En particular, se han caracterizado las resonancias asociadas a trímeros de nanopartículas de formas diversas, con especial énfasis en la intensificación de la fluorescencia de moléculas aisladas situadas a distancias nanométricas de dichas nanoantenas. Si bien los trímeros no proporcionan ninguna ventaja distinta de los dímeros en la intensificación SERS, sí pueden ser especialmente adecuados para SEF, por cuanto presentan varias resonancias plasmónicas, a distintas frecuencias, que se pueden explotar para intensificar doblemente la fluorescencia: a la frecuencia de bombeo y a la de emisión. Para demostrarlo, se han calculado los espectros de *scattering* de los nanotrímeros acoplados ópticamente, y los factores de decaimiento radiativo y no radiativo (y de la eficiencia cuántica) de una molécula situada a distancias nanométricas de dichos nanotrímeros.

EXCITACIÓN DE POLARITONES-PLASMONES SUPERFICIALES POR NANOHILOS SEMICONDUCTORES

Se ha avanzado en el estudio teórico, basado en sendas formulaciones (ecuaciones reducidas de Rayleigh y ecuaciones integrales de superficie), sobre la propagación y *scattering* de polaritones tipo plasmón superficial (PPS, ondas EM superficiales híbridas entre fotones rasantes y oscilaciones del plasma electrónico), en el visible e IR sobre superficies metálicas con defectos submicrométricos, de enorme interés en Nano-Óptica. En particular, en colaboración con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de *FOM-Institute AMOLF (Amsterdam)* y *Philips Research Labs (Eindhoven)*, se han reproducido e interpretado medidas experimentales de excitación de PPS por fotoluminiscencia de nanohilos de InP, a partir de los datos que la microscopía confocal proporciona de la excitación y propagación de PPS, y su posterior dispersión espacial por una estructura periódica de canalones nanométricos concéntricos tipo *ojo de buey*.

Por otro lado, fenómenos ópticos clásicos como el efecto Talbot y la formación de caústicas se han investigado formalmente en el caso de ondas cuasi-2D como son PPS, proponiendo esquemas para observar experimentalmente dichos análogos y mostrando los resultados esperados.

2A.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación de reacciones de polimerización y de propiedades físicas de polímeros.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.
- Física de polímeros: movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoestructura de películas delgadas poliméricas.
- Nanocompuestos poliméricos: estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Conformación de materia blanda biológica: proteínas de membrana en disolución.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.
- Fenómenos de precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Síntesis de poliolefinas funcionalizadas.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión en mezclas de poliolefinas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Biofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- o 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.
- o Calorimetría diferencial de barrido.
- o Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- o Microscopía óptica, microscopía electrónica de barrido (SEM).
- o Espectroscopía Raman.
- o Micro- y nano-dureza.
- o Dispersión de neutrones.
- o Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- o Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- o Reometría de extrusión capilar.
- o Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- o Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- o Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- o Microscopía óptica y de fuerzas atómicas (AFM).
- o GPC y dispersor de luz multiángulo a alta temperatura.

LABOR INVESTIGADORA

NUEVOS CATALIZADORES DE Ni PARA COPOLIMERIZACION DE OLEFINAS CON MONÓMEROS POLARES.

En colaboración con el grupo del profesor Juan Cámpora de la Universidad de Sevilla se ha realizado un estudio teórico sobre la idoneidad de catalizadores N-óxido de iminopiridina basados en Ni y sintetizados en la Universidad de Sevilla, para la copolimerización de etileno y metilacrilato. Experimentalmente, se obtenían resultados contradictorios acerca de la incorporación de metilacrilato en el copolímero con un catalizador metil sustituido en el grupo imino. Los estudios teóricos realizados sobre los procesos de complejación e inserción de ambos monómeros catalizados por dicho compuesto indicaban la habilidad del mismo para la incorporación del monómero polar en el copolímero. Estos resultados animaron a realizar nuevos experimentos de polimerización, confirmando la idoneidad de dichos catalizadores para la copolimerización de olefinas y monómeros polares.

CATALIZADORES BASADOS EN HIERRO PARA LA POLIMERIZACIÓN DE OLEFINAS

Como continuación a las observaciones realizadas en trabajos anteriores en nuestro grupo de investigación acerca de la idoneidad del estado de oxidación Fe (III) como especie activa en la polimerización de olefinas, hemos realizado un estudio acerca de la reactividad de dichas especies en comparación con las correspondientes a Fe (II). A la vista de los perfiles de reacción asociados a los procesos de inserción de olefina y terminación de la polimerización, se concluye que la especie Fe (III) es más activa y da menores pesos moleculares del polímero que la especie Fe (II). Estos resultados están de acuerdo con las observaciones experimentales, que reportan una distribución de pesos moleculares muy ancha, en las cuales cabe distinguir la aportación, principalmente, de dos especies activas distintas. Estudios cinéticos confirman que la especie responsable del menor peso molecular es la más activa y que tiende a desaparecer a lo largo del periodo de reacción. Estas observaciones están de acuerdo con nuestros cálculos, donde la especie de Fe (III), siendo la más reactiva, tiende a reducirse en presencia de un medio de reacción reductor.

SIMULACIÓN DE RECEPTORES CANNABINOIDES CB1 Y CB2

En colaboración con el Dr. Juan Antonio Páez del Instituto de Química Médica (IQM) se ha estudiado la estructura molecular de receptores cannabinoides CB1 y CB2, presentes en multitud de procesos biológicos. La principal hipótesis sobre la actividad de estos receptores supone la presencia de dos formas estructurales, una activa y otra inactiva. Sin embargo no se ha podido determinar experimentalmente su estructura terciaria. Algunos modelos presentes en la literatura parten de una proteína homóloga, la rodopsina bovina, en su forma inactiva, cuya estructura fue determinada por cristalografía. Hemos realizado simulaciones de Dinámica Molecular en disolvente acuoso sobre modelos de CB1 y CB2 inactivos obtenidos por homología y aportados por el grupo del IQM. Ambos receptores se comportan de manera diferente durante la simulación, lo que aporta información valiosa acerca de la diferente selectividad frente a ligandos cannabinoides, tal como se observa experimentalmente.

PROCESOS DE CRISTALIZACIÓN TEMPRANA DE MODELOS DE POLIETILENO CON RAMIFICACIONES DE CADENA CORTA

Se ha estudiado la cristalización de polímeros lineales mediante simulaciones de dinámica molecular en disoluciones diluidas y en fundido. Sin embargo, el papel de la ramificación corta (SCB) sobre la etapa de nucleación no ha sido convenientemente tratado. Para seguir como los segmentos de las cadenas se orientan unos respecto a otros se ha definido un parámetro de orden global (S). A altas temperaturas ($T^* \sim 13.3-12.5$) el parámetro S es cercano a cero para todos los sistemas, lo cual significa una configuración de ovillo estadístico. A temperaturas más bajas que $T^* \sim 12.5$, el parámetro S incrementa a medida que desciende la temperatura, indicando la formación de orden global. La velocidad de crecimiento muestra una dependencia del contenido en ramificación, disminuyendo en valor a medida que aumenta el contenido en rama. A las temperaturas más bajas el parámetro S alcanza un valor estable entre 0.65 y 0.80. La velocidad global del proceso de cristalización se desplaza a temperaturas más bajas a medida que aumenta el contenido en ramificación. Este pico se puede suponer como una temperatura de cristalización, la cual disminuye al aumentar el número de co-unidades de acuerdo con los datos experimentales.

Se puede observar que el desarrollo de estructuras ordenadas es diferente para los sistemas PE-00 y PE-10. La formación de orden en PE-00 es evidente a una temperatura de $T^* = 10.6$, observándose un aumento del espesor lamelar a medida que se baja la temperatura. Por el contrario, el sistema PE-10 forma segmentos paralelos más pequeños a una temperatura T^* similar a la vez que las ramificaciones emigran a la superficie de plegado. Una vez que las ramificaciones se han colocado en la superficie de plegado, se observa un crecimiento de los segmentos en paralelo. Se puede pensar en una exclusión total de las ramificaciones en la fase cristalina de los resultados de simulación.

SIMULACIÓN Y EXPERIMENTOS PARA LA OBTENCIÓN DEL TIEMPO DE RELAJACIÓN DE ENMARAÑAMIENTOS EN POLIETILENO

Se ha realizado un estudio combinado de simulación y experimentos para describir las propiedades viscoelásticas y la dinámica molecular del polietileno lineal y ramificado. A partir de estas simulaciones se han obtenido el peso molecular entre enmarañamientos, el tiempo de relajación entre enmarañamientos de forma directa y por primera vez para este tipo de materiales. La conclusión más importantes de este trabajo es que la combinación de técnicas de simulación avanzadas para obtener estas propiedades inaccesibles de forma experimental, junto con la aplicación de modelos topológicos, permiten explicar la huella viscoelástica de un conjunto de materiales sin utilizar ningún parámetro ajustable. Asimismo, se ha comprobado que las trayectorias de las coordenadas monoméricas explican perfectamente los resultados existentes en la literatura en polímeros modelo mediante difracción incoherente de neutrones.

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES FÍSICAS DE MODELOS MOLECULARES: ESTRUCTURA DEL CATALIZADOR Y TOPOLOGÍA MOLECULAR (PROYECTOS COMOCOMO Y CICYT)

En el marco de los proyectos financiados se ha realizado un estudio básico de las propiedades en modelos moleculares obtenidos mediante catalizadores de centro activo único de paladio (Pd) y catalizadores para síntesis dual. Los catalizadores de Pd pueden controlar la topología de las cadenas, de manera que se obtienen tanto estructuras lineales como estructuras hiperramificadas o dendríticas. Se ha estudiado este tipo de materiales en colaboración con la Universidad de Sevilla. El introducir de manera precisa en las poliolefinas grupos polares y funcionales está atrayendo considerable atención, ya que puede dar lugar a propiedades específicas como mejora de la procesabilidad, adhesión y compatibilidad con otros materiales, e incluso, con sistemas biológicos. Los materiales estudiados presentan propiedades características, asociadas a una arquitectura molecular muy compleja. En cuanto al desarrollo de nuevos materiales bimodales con propiedades específicas obtenidas mediante síntesis dual, se han estudiado diversas familias de polietilenos, obtenidos mediante un novedoso proceso de catálisis que supone la mezcla de sistemas catalíticos. El estudio de los materiales obtenidos mediante diversas condiciones de reacción pone de manifiesto resultados novedosos, en cuanto a la obtención de mayores pesos moleculares en presencia de hidrógeno, que han sido explicados mediante la simulación por ordenador. Así, se ha generado una nueva familia de materiales con distribuciones de peso molecular que permiten realizar estudios sistemáticos del efecto de la cola de alto peso molecular en las propiedades físicas.

PROPIEDADES DE SISTEMAS COMPUESTOS DE POLIOLEFINA Y NANOTUBOS DE CARBONO (COLABORACIÓN USB)

En colaboración con la Universidad Simón Bolívar se ha estudiado la morfología, las propiedades térmicas, mecánicas y reológicas de una serie de mezclas de polietileno y nanotubos de carbono. Los resultados obtenidos para las propiedades en fundido son inusuales. Para los contenidos estudiados se produce una disminución de la viscosidad y del módulo elástico con respecto a la del polímero base, que se podría atribuir a la adsorción selectiva de las especies de mayor tiempo de relajación sobre la superficie de los nanotubos. Esto tiene grandes implicaciones, ya que provoca una mejora de la procesabilidad en extrusión, aunque por otro lado supone una disminución en la viscosidad elongacional y en la resistencia del fundido.

COLABORACIÓN CON LA INDUSTRIA: NUEVOS MATERIALES CON PROPIEDADES ESPECÍFICAS DE USO

Se ha continuado con la colaboración con la industria, concretamente con dos empresas del sector de los materiales poliméricos: Dow Chemicals y Repsol-YPF. En este contexto se han desarrollado actividades de investigación para la transferencia de conocimiento en el desarrollo de nuevos materiales de base olefinica con propiedades específicas, en las que han estado involucrados dos estudiantes de post-grado (Jon Otegui de la Fuente y Nuria Robledo Álvaro). La investigación pretende cubrir dos objetivos específicos: por un lado el diseño de un material capaz de resistir las altas presiones en grandes colectores de gas y por otro optimizar las propiedades ópticas y mecánicas de películas biorientadas. Durante el desarrollo de las distintas colaboraciones, se han celebrado reuniones y seminarios periódicos (tri o cuatrimestrales), tanto en el Instituto de Estructura de la Materia como en los Centros Tecnológicos de las empresas, en los que se han presentado los resultados obtenidos más relevantes.

CONFINAMIENTO EN LA ESTRUCTURA Y LA DINÁMICA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA

Las macromoléculas confinadas en espacios nanométricos (similares al tamaño de las moléculas en sí) muestran cambios no triviales en su estructura y su dinámica, y, además, sus propiedades físicas dependen del tamaño de dicho espacio de confinamiento. Por ejemplo, algunos "sólidos" macromoleculares se convierten en "líquido" si se confinan en forma de película delgada (otras, al contrario, se "endurecen"). Entre los diferentes métodos de confinamiento, nuestro grupo está trabajando principalmente en tres:

- La inclusión de nanopartículas en sistemas macromoleculares, dando lugar a confinamiento en volumen. De este modo las macromoléculas quedan atrapadas entre las partículas sólidas. Entender cómo y por qué cambian las propiedades de macromoléculas en confinamiento es crucial para el desarrollo de la nanotecnología que se basa en gran medida en la materia blanda. En este proyecto buscamos comprender cómo cambia la estructura, la dinámica y las propiedades físicas de macromoléculas sometidas a este tipo de confinamiento. Este estudio requiere una combinación de técnicas experimentales, incluyendo la dispersión de rayos X y de neutrones, espectroscopía dieléctrica, calorimetría, así como la microscopía de fuerza atómica y la espectroscopía Raman.

- Infiltración de las cadenas de polímeros en materiales porosos. Por medio de dispersión de rayos X y espectroscopía dieléctrica hemos investigado la dinámica y la estructura en sistemas confinados de polímeros modelo, y hemos observado que el balance entre el confinamiento espacial y las interacciones interfaciales controlan, en la escala nanométrica, la dinámica y estructura de los polímeros semicristalinos.

- Películas delgadas poliméricas. Hemos desarrollado el 'know-how' para la preparación de películas delgadas con espesores en el rango de 10 a varios cientos de nanómetros. El objetivo es estudiar la nanoestructura y la dinámica de las cadenas de polímero en el confinamiento impuesto por esta geometría. En particular estamos interesados tanto en el estudio de los mecanismos físicos que controlan el mojado total o parcial del sustrato por el recubrimiento polimérico, como en el estudio de la nanoestructura cristalina controlada por la interacción entre el sustrato y la película polimérica.

Nuestros hallazgos contribuirán a la plena explotación de estos nuevos materiales para su aplicación en diversos ámbitos de la nanotecnología.

INTERRELACIÓN ESTRUCTURA-DINÁMICA EN MATERIA CONDENSADA BLANDA POLIMÉRICA

Hemos continuado la línea de investigación experimental encaminada a obtener tanto información estructural, mediante difracción de rayos X, como dinámica, mediante espectroscopía dieléctrica, de forma simultánea durante procesos de ordenamiento en polímeros. Para la realización de estos experimentos hemos hecho uso de luz sincrotrón en el "Deutsches Elektronen Synchrotron" (DESY) de Hamburgo, Alemania y en el "European Radiation Synchrotron Facility (ESRF)" de Grenoble, Francia. En particular hemos investigado el ordenamiento cristalino en muestras de poliésteres aromáticos como politrimetilenteraftalato (PPT) en un amplio espectro de frecuencias. Los resultados obtenidos han contribuido a comprender los mecanismos de cristalización y su influencia en la dinámica de las cadenas amorfas. En este campo se ha iniciado también un proyecto para observar cambios en la dinámica en el vidrio en función de la cristalinidad del sistema. Estos experimentos se han realizado mediante dispersión cuasielástica de neutrones en el Instituto Laue Langevin (Grenoble, Francia).

NANOCOMPOSITES POLIMÉRICOS BASADOS EN NANOTUBOS DE CARBONO Y NANOFIBRAS DE CARBONO

Continuando la actividad de nuestro grupo en nanocompuestos de interés tecnológico se han investigado los mecanismos de conducción en una serie de sistemas usando como matriz un polímero de uso habitual, como es el polietileno, cargado con nanoaditivos basados en carbono, en particular, nanofibras y nanotubos. Para ello, se ha realizado un estudio de la dependencia de la conductividad en función de la frecuencia y de la carga y el tipo del nanoaditivo. También hemos estudiado la nanoestructuración en condiciones de reposo y bajo campos de cizalla de nanocompuestos de poliésteres aromáticos y nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT), intentando correlacionar los resultados obtenidos con las propiedades físicas (eléctricas, ópticas y mecánicas) de dichos sistemas.

BIOFÍSICA: CONFORMACIÓN DE LA PROTEÍNA DE MEMBRANA INTEGRINA $\alpha_{2b}\beta_{III}$

Mediante técnicas de dispersión de rayos X y de neutrones es posible extraer información sobre la conformación de sistemas de interés biológico, como por ejemplo, proteínas en disolución. Mediante dispersión de neutrones a bajo ángulo, utilizando la posibilidad de elegir el contraste entre el disolvente y la proteína, se están realizando experimentos con objeto de obtener información sobre las conformaciones que tiene la proteína Integrina $\alpha_{2b}\beta_{III}$ en una disolución micelar, que en cierto modo pueda reproducir su conformación cuando se encuentra insertada en la membrana celular. Los resultados obtenidos pueden ayudar a aumentar el conocimiento sobre la función y el mecanismo de actuación de dicha proteína.

ESTUDIO DE PROPIEDADES MECÁNICAS DE NANOCOMPUESTOS BASADOS EN COPOLÍMEROS DE TRES BLOQUES Y SILICATOS LAMINARES MODIFICADOS ORGÁNICAMENTE

Los nanocompuestos han sido preparados mediante solidificación rápida a partir de disolución y posterior proceso de deformación de cizalla en el fundido. Se ha determinado la dispersión de la nano-carga en la matriz polimérica y su influencia sobre el comportamiento mecánico de los materiales compuestos por medio de diferentes técnicas microscópicas, ensayos mecánicos de tracción, análisis mecano-dinámico y medidas de microdureza. Se ha puesto en evidencia que el procedimiento utilizado para obtener los nanocompuestos es el más apropiado para conseguir una dispersión óptima de la nano-carga. Se ha observado un aumento significativo del módulo de Young para un contenido de carga de un 10% en peso, mientras que el resto de propiedades mecánicas permanecen invariables. Mediante medidas de microindentación se ha verificado que el refuerzo mecánico, en función del contenido de carga, va en paralelo a un aumento de la microdureza.

EVALUACIÓN COMPARATIVA DE LA ESTRUCTURA MULTILAMINAR EN PELÍCULAS DE POLI (TEREFTALATO DE ETILENO) Y POLICARBONATO (PET/PC) POR MEDIO DE USAXS Y AFM

Se ha analizado mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS), el ensamblaje forzado mediante la técnica de co-extrusión multiplicadora de dos polímeros inmiscibles inicialmente amorfos. El material ha sido producido en el laboratorio de los profesores E. Baer y A. Hiltner en la Universidad Case Western Reserve en Cleveland, Ohio (Estados Unidos). La comparación de los resultados de dispersión de rayos X y de microscopía de fuerzas atómicas (AFM) pone al descubierto muchos detalles de la estructura nano-laminar de las películas de PET/PC. Utilizando la técnica de USAXS en configuración paralela, pero con el haz ligeramente rotado con respecto a la superficie de las películas, se han conseguido observar los máximos de intensidad que corresponden a las periodicidades del empaquetamiento de láminas. Mediante tratamiento térmico de las películas se provoca la cristalización del PET, lo que aumenta la diferencia de densidad electrónica entre capas adyacentes y se traduce finalmente en un aumento de intensidad de los máximos de dispersión. Los largos espaciados experimentales obtenidos mediante USAXS están en buen acuerdo con los valores previstos para las periodicidades de los sistemas multicapas obtenidos por co-extrusión. Las imágenes de AFM obtenidas en regiones muy localizadas muestran periodicidades que también concuerdan bien con los datos de USAXS, que están referidos a un promedio sobre áreas mucho más grandes. La aparición de al menos dos máximos de dispersión en todas las muestras investigadas demuestra que la nanoestructura obtenida mediante la técnica de procesado por co-extrusión puede llegar a tener una gran regularidad.

MODIFICACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE MATERIALES COMPUESTOS DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO ENTRECRUZADO Y ARCILLA

Este trabajo constituye una extensión de nuestro estudio sobre la modificación de mezclas de polipropileno isotáctico y polietileno de baja densidad mediante entrecruzamiento químico. En colaboración con el Dr. S. Bouhelal, de la Universidad de Sétif (Argelia), se han investigado materiales compuestos de polipropileno isotáctico, entrecruzado reversiblemente por vía química, y arcilla. Estos materiales se han preparado mediante dos métodos diferentes, y se ha conseguido incorporar la arcilla en cantidades de hasta un 50 %. Las muestras se han caracterizado mediante difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y medida de la microdureza. Los resultados obtenidos sugieren que la arcilla podría presentar exfoliación total en alguna de las composiciones estudiadas. Cuando la proporción de arcilla es superior al 20%, se restringe la movilidad de las cadenas poliméricas, y el grado de cristalinidad alcanzado es menor. La microdureza del material resultante depende del contenido en arcilla y del método de preparación elegido. Existe una correlación lineal entre la microdureza y la cristalinidad de las distintas muestras.

DESARROLLO DE LA MORFOLOGÍA DURANTE LA CRISTALIZACIÓN INDUCIDA POR FLUJO DE CIZALLA EN POLÍMEROS

Es sabido que los flujos aplicados durante el procesado pueden alterar significativamente la cinética de cristalización y el desarrollo estructural de los polímeros semicristalinos. Continuando con nuestra colaboración con el grupo de la Prof. J.A. Kornfield, del Instituto Tecnológico de California (CALTECH), se ha puesto a punto una configuración experimental que combina la enorme potencialidad de un sistema de cizalla de respuesta rápida con técnicas simultáneas de medidas ópticas y de rayos X. Con este dispositivo se pueden enlazar los sucesos más iniciales de la cristalización inducida mediante flujo de cizalla en el estado fundido de un polímero con el desarrollo inmediatamente posterior de la cinética y la morfología. A pesar de estar enormemente diluidos, la sensibilidad de las medidas reo-ópticas permite la detección de precursores orientados mediante el flujo de cizalla mucho antes de que las técnicas de rayos X sean capaces de observarlos. Posteriormente, cuando se produce la cristalización a partir de estos precursores, mediante difracción de rayos X se puede realizar una detallada cuantificación de las características y la cinética de crecimiento de los nanocristales que nuclean a partir de los

precursores inducidos por cizalla. La combinación simultánea de estas técnicas permite un análisis sin ambigüedades de los primeros sucesos que ocurren durante el flujo de cizalla y de la evolución de la cristalización cuando el flujo se ha detenido. Se elimina así la incertidumbre provocada por la extrema sensibilidad de la cristalización inducida bajo flujo, cuando se realizan cambios mínimos en el esfuerzo aplicado o en el tipo de material. Utilizando esta configuración experimental, se han analizado datos de una mezcla bimodal de polipropilenos isotácticos.

PROCESOS DE RE-CRISTALIZACIÓN EN PET

El origen de las múltiples endotermas que se observan mediante la técnica de calorimetría diferencial de barrido (DSC) en un ciclo de calentamiento de PET semicristalino ha sido objeto de numerosos trabajos de investigación y sigue siendo hoy en día motivo de controversia. En nuestro laboratorio de investigación hemos llevado a cabo un estudio sobre los cambios nanoestructurales asociados a dichas endotermas. Para ello, se han empleado técnicas de difracción de rayos X a ángulos pequeños y grandes de manera simultánea, utilizando instalaciones de radiación sincrotrón. Se ha investigado la variación del grado de cristalinidad, el tamaño lateral de coherencia cristalina y el largo espaciado, en función de la temperatura, para muestras de PET cristalizadas desde el estado vítreo. Asimismo, se ha empleado el análisis de la Función de Distribución de Interfases (IDF) para determinar el espesor de las laminillas cristalinas y de las regiones interlaminares. Los resultados sugieren que, independientemente de la temperatura de cristalización, todas las muestras sufren un proceso de reorganización nano-estructural desde temperaturas inmediatamente superiores a la temperatura de transición vítrea ($T_g \approx 80^\circ\text{C}$) hasta la temperatura de fusión ($\approx 260^\circ\text{C}$). Se ha observado que la endoterma de baja temperatura que aparece en los termogramas de calorimetría coincide con un mecanismo de fusión y re-cristalización que se detecta mediante difracción de rayos X inmediatamente por encima de la T_g . Por otra parte, se ha podido concluir que durante el ciclo de calentamiento se generan laminillas cristalinas que contribuyen de manera sustancial a la endoterma de alta temperatura observada mediante DSC.

APROXIMACIÓN TERMODINÁMICO-ESTADÍSTICA AL ESTUDIO DE LOS ÚLTIMOS ESTADIOS DE LA CRISTALIZACIÓN EN POLÍMEROS SEMI-RÍGIDOS

Las aproximaciones teóricas que existen en la actualidad para describir el proceso de cristalización en polímeros no tienen en cuenta el confinamiento que, como consecuencia de dicho proceso, sufren las regiones interlaminares y que, finalmente, determina el final del proceso de cristalización. En este trabajo se han desarrollado unos modelos, basado en termodinámica estadística, para describir algunos aspectos de los últimos estadios del proceso de cristalización en polímeros. El modelo se ha contrastado con resultados experimentales de difracción de rayos X a ángulos pequeños y grandes, así como de análisis térmico mecano-dinámico en PET cristalizado desde el estado vítreo. Los resultados sugieren que en los estadios finales de la cristalización se desarrolla una fase amorfa rígida (RAF) en la interfase entre las laminillas cristalinas y las regiones interlaminares, y que se caracteriza por una orientación parcial de sus cadenas moleculares. Se han empleado conceptos de mecánica estadística para describir el papel que juega la RAF, principalmente en lo que concierne a su efecto de estabilizador de la estructura de laminillas cristalinas durante los procesos de reorganización estructural que tienen lugar a temperaturas inmediatamente superiores a la temperatura de transición vítrea. Este modelo se ha discutido en base a un diagrama de fases de las distintas estructuras presentes durante dicha reorganización estructural. Asimismo, se ha estimado el aumento de potencial químico en las regiones interlaminares debido al confinamiento de los cristales. Finalmente, cálculos previos que se habían desarrollado en base a un modelo de cadenas gaussianas (F.J. Baltá Calleja *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224201 (2007)), han permitido estimar el grado de orientación molecular asociado a los correspondientes procesos de reorganización estructural.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Computational methods in gravitational physics.
- Black hole and analogs in condensed matter.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.

TECHNIQUES:

- o Theoretical and mathematical physics.
- o Computational methods.

RESEARCH ACTIVITIES

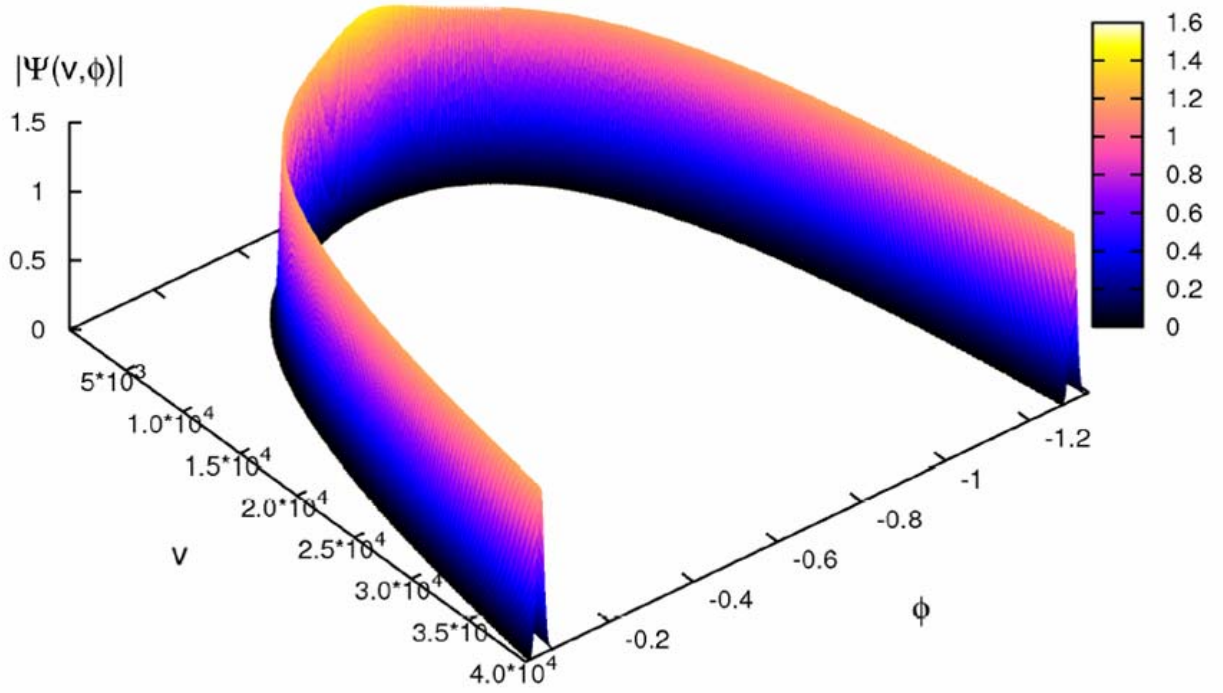
GRAVITATION AND COSMOLOGY

During 2008, we have continued our research in the already traditional lines of the Gravitation and Cosmology Group of the “Instituto de Estructura de la Materia”, such as the quantization of cosmological models in General Relativity, the inclusion in those models of fields with an infinite number of degrees of freedom, corresponding to inhomogeneities, or the study of black hole analogues in Condensed Matter Physics.

As for the quantization of cosmological models obtained in General Relativity by the imposition of symmetries, we have first completed the analysis of the standard quantization (of Fock type) in the Gowdy cosmologies with linearly polarized gravitational waves. These cosmologies describe families of solutions to the Einstein’s equations with compact spatial sections and containing local degrees of freedom, corresponding to the inhomogeneities associated with the gravitational waves. In previous works, where the discussion had been focused on the case of the three-torus topology, we had shown that it is possible to attain a consistent quantum theory to describe this cosmological system employing standard techniques of Quantum Field Theory in curved space-times. This consistency includes the implementation of the dynamics of the system (once the time gauge has been suitably fixed) as a unitary quantum transformation, compatible with the standard probabilistic interpretation of Quantum Mechanics. In such a quantum theory, a Fock representation is adopted for the scalar field which contains the local degrees of freedom associated with the gravitational waves. This quantization is the first satisfactory quantum description of a cosmological model with inhomogeneities in the literature. Furthermore, the quantum theory so constructed is in fact the only Fock quantization of the system which is physically acceptable, since, if one requires that the evolution and a remanent homogeneous symmetry be implemented as unitary transformations, the adopted Fock quantization turns out to be unique, up to equivalencies which do not alter the physical results. This property is really remarkable, and provides considerable strength to the conclusions derived from the quantization. These results have been completed during 2008, proving in a rigorous and definitive way that the uniqueness of the Fock representation holds for all the possible topologies of the Gowdy cosmologies: those of the three-torus, the three-sphere, and the circle times the two-sphere. There are no precedents in the literature of uniqueness theorems like this in the context of Quantum Field Theory in curved, time-dependent space-times.

Moreover, continuing with the study of these Gowdy cosmologies, we have succeeded in extending the quantization to the system without a complete gauge fixing of time and replacing the quantization techniques used in Quantum Field Theory with those of Loop Quantum Gravity. Let us recall that Loop Quantum Gravity is a firm candidate for a nonperturbative quantum theory of gravity. It attempts to canonically quantize General Relativity while preserving its background independence. Its starting point is a formulation of General Relativity in terms of connections and densitized triads introduced by Ashtekar. The key role played by connections makes possible the use of loop quantization techniques traditionally employed in gauge theories. For Loop Quantum Gravity the gauge group can be identified with $SU(2)$. The theory is subject to constraints which arise owing to the gauge invariance and background independence. Specifically, this independence implies spatial diffeomorphism

invariance and the presence of a Hamiltonian constraint. A regularization of the Poisson algebra of connections and triads leads to a holonomy-flux algebra, where densitized triads are integrated over surfaces and connections over edges. This algebra is represented by operators acting on functions of the connection constructed in terms of the so-called “spin network” functions, which are defined by a graph (collection of edges), an $SU(2)$ representation for each edge, and an “intertwiner” (for the composition of representations) at each vertex [1]. The quantization program is not complete yet: one needs to impose the Hamiltonian constraint to determine definitively the Hilbert space of quantum states. Among the successes of the program, one of the major ones is the application to cosmological models. So far, the studied models were very simple, provided with homogeneity and, therefore, with only a finite number of degrees of freedom. In these cases, it had been shown (by members of our group) that the loop quantization removes the cosmological, big bang singularity. Nevertheless, as we have already mentioned, up to date only isotropic homogenous models had been investigated in full detail, and other homogenous models only to a certain extent. Of course, making testable predictions requires the analysis of more general models, in particular inhomogeneous ones. With this motivation, we confronted in 2008 the quantization of the Gowdy model with linear polarization and three-torus topology by means of Loop Quantum Gravity techniques.



Numerical simulation of the big bang singularity resolution by means of a quantum bounce: the big bounce (T. Pawłowski et al.).

As we have partially commented, this Gowdy model can be interpreted as a gravitational wave propagating in a homogenous space-time, which corresponds to an anisotropic cosmology of the Bianchi I type. The classical solutions present, generically, an initial big bang singularity. For the description of the degrees of freedom associated with the gravitational wave (except its zero mode, which can be absorbed in the Bianchi I geometry), we adopted the Fock quantization which had been proved to exist and be unique for the system. For the geometry degrees of freedom that define the Bianchi I cosmology, we employed a true loop quantization. In this way, we could show that the inclusion of inhomogeneities has no influence in the removal of the cosmological singularity in the quantum theory, within the framework of Loop Quantum Gravity. The obtained quantization is the most complete quantization of a model with an infinite number of degrees of freedom achieved so far in Loop Quantum Cosmology.

In addition, the rigorous study of the Bianchi I cosmology using loop methods, necessary to carry out the analysis of the Gowdy system, allowed us to obtain interesting results in such a homogenous model, which had been partially analyzed in the literature. Thus, we proved the self-adjointness of the operators involved in the quantization, we determined correctly the superselection sectors, we obtained the exact and complete solution to the Hamiltonian constraint, and we completed the quantization program, determining the Hilbert space of physical states. In the context of this model in vacuo, we also discussed the problem of defining the notion of evolution in the absence of a clock provided by a matter field. The solution was attained by constructing certain families of unitarily related partial observables, which we then used to study the system dynamics. Besides it was shown, once again, that the cosmological singularity of the model disappear when carrying out a loop quantization.

Further investigation of the universe dynamics and the physical effects of Loop Quantum Cosmology was carried out in the case of homogenous and isotropic space-times, in which we checked the robustness of the big bounce scenario, process in which a contracting universe eludes the collapse to a singularity by means of a transition to an expanding universe owing to repulsive forces originating at near-Planck energy density scales from space-time discreteness. In particular, we studied the dynamics of a homogeneous and isotropic universe with cosmological constant, where the analysis of universes with semiclassical behavior at late times confirmed the presence of the bounce, which for this model leads to quasi-periodicity of the universe evolution.

Another front of research on which we have been working is related to modified theories of gravity. The motivation comes from the accelerated expansion observed in the universe, which is a deep theoretical problem that has been thoroughly studied in the last years. Our contribution has focused on the study of modified theories of gravity of the $f(R)$ type. Since infrared corrected models tend to be dominated by instabilities, we have tried to find models free of such problems. This search, in addition, has allowed us to find a covariant effective $f(R)$ action able to exactly reproduce the dynamics of Loop Quantum Cosmology in the homogeneous and isotropic case.

On the other hand, the study of quantum correlation functions in curved space led us to reconsider the standard derivation of the power spectrum of the inflaton field in the early universe. Motivated by the way in which the Hawking, the Gibbons-Hawking, and the Davies-Fulling-Unruh effects are derived by means of correlation functions, we proposed a redefinition of the power spectrum that naturally solves the problem of the amplitude during inflation: the amplitude of the power spectrum of the inflaton is no longer driven by the Hubble constant, H , but by the square of the inflaton mass, which allows for a high value of H and a sufficiently low spectral amplitude in agreement with the observation of anisotropies in the cosmic microwave radiation.

Within the context of analogue models, we have examined the role of modified superluminal dispersion relations in the late-time black-hole radiation. In particular, we have seen that the horizon becomes effectively a frequency-dependent concept and there is a critical frequency above which modes experience no horizon at all. This fact together with the spectral dependence of the effective surface gravity may give rise to important modifications of the late-time radiation spectrum.

As for the employment of computational methods in gravitation, we have continued the development of specialized tools for tensor computer algebra and their application to problems of interest in General Relativity. These tools are designed as independent packages for *Mathematica*, the world-leading system in computer algebra, and together form the *xAct* framework, (<http://metric.iem.csic.es/Martin-Garcia/xAct/> under the GPL license). This year we have improved the capabilities and efficiency of the central package, called *xPerm*, for fast manipulation of finite groups. We have published its main properties together with comparisons showing that our code is several orders of magnitude faster than other existing systems, including commercial ones.

The *xAct* system has been applied to four different problems. First, we have extended our database of Riemann relations to include differential invariants of the Riemann tensor, increasing the number of stored relations by a factor 30, up to more than $6 \cdot 10^5$. This allows a fast and unique expansion of any invariant containing up to 12 derivatives of the metric in terms of a basis. A recent result by Coley et al. shows that all space-times can be classified using Riemann invariants except for those in the degenerate Kundt class (which is very small with respect to the total). Our system can be of great help to handle those space-times. A second application has been high-order perturbation theory, where we have constructed the package *xPert*, which produces highly efficiently the expressions of high-order perturbations of arbitrary curvature tensors. Third, in the same area, we have developed a new combined technique to construct gauge invariant and scalar perturbations, describing gravitational radiation. The final application has been spinor calculus, where the package *Spinors* has been constructed and used to show that the lower bound for the number of derivatives needed to classify type D space-times in the Karlhede classification is two, and not three.

CLASSICAL AND QUANTUM TREATMENT OF SYMMETRY REDUCTIONS IN GENERAL RELATIVITY

We have recently completed the Hamiltonian formulation for Gowdy models coupled to matter -specifically massless scalar fields in the three possible spatial topologies (the 3-torus, the 3-handle and the 3-sphere) by using modern geometrical methods for the treatment of dynamical systems. The resulting systems have been interpreted in terms of massless scalar fields evolving in background space-times that are conformally equivalent to simple flat metrics such as the flat one in the 3-torus case, and the Einstein metric for the sphere in the case of the other topologies. Precisely, the time dependent conformal factor encodes the singularities present in the classical dynamics, a fact that has been used to analyze the unitary implementability of the dynamics in the quantum versions of these models. In particular we have focused on the 3-handle and 3-sphere topologies, less known than the 3-torus ones but equally relevant in quantum cosmology because they have both final and initial singularities.

As it has been recognized in the 3-torus case, there are some obstructions that preclude the definition of a unitary quantum evolution when these models are described in terms of the natural dynamical variables that appear in their Hamiltonian treatment. This problem can be solved by performing time-dependent field redefinitions of them that involve, precisely, the conformal factors mentioned above. The methods that we have used and developed have allowed us to obtain, in addition, a particularly simple proof of the uniqueness of the representation of the algebra of quantum observables. Finally, and as an extension of the previous results, we have formulated Schrödinger functional representations for these models in which the quantum states are characterized as functionals defined in suitable probability spaces that provide a very useful framework to discuss issues of physical interest such as the existence of semiclassical states.

Despite the fact that the previous results have been found in the restricted context of the Gowdy cosmological models one might hope that the techniques that we have used in the treatment of these systems can be used to identify and solve similar problems related to the unitary implementability of the dynamics of quantum field theories in sufficiently symmetric backgrounds. However, as a counterexample of the behaviors found for Gowdy models we have proved the impossibility to find invariant Fock representations under the symmetries of the field equations for scalar fields evolving in de Sitter backgrounds with unitary implementable evolution. The reason behind this failure is basically the appearance of imaginary frequencies in the description of this system as an ensemble of independent quantum oscillators.

BLACK HOLE ENTROPY IN LOOP QUANTUM GRAVITY

The work in this area has led to a very significant advance in the understanding of the mathematical problems that arise in the study of the behavior of the black hole entropy in loop quantum gravity (LQG). In this sense the most pressing problem at the present moment is to find out whether the effective entropy quantization (and area) observed for microscopic black holes in the classic paper by Corichi, Polo Diaz, and Fernández Borja is also present for macroscopic black holes. If this were the case we would have a remarkable prediction of LQG that connects in a remarkable way with the expected behavior for the entropy derived from very general considerations by Bekenstein and Mukhanov.

Our results have confirmed the initial findings on the entropy quantization (obtained through estimates obtained by brute force algorithms). From a technical point of view the progress that we have made is based on the exact resolution of the combinatorial problems involved in the calculation of the entropy by resorting to number-theoretical and combinatorial techniques. In the first case we have obtained an exact characterization of the spectrum of the area operator through the use of Pell's equation (a quadratic diophantine equation) and a family of auxiliary linear diophantine equations. In this way we have been able to explicitly describe the degenerations of the area operator and obtain one of the necessary elements for the analytical understanding of the behavior of the entropy. At a different level we have been able to use these results to obtain generating functions for the black hole entropy that can be used to understand its asymptotic behavior (and thus see if the observed effective quantization is present in macroscopic scales). Obtaining an analytic expression for this asymptotic behavior is the most important open problem in this field at the present moment. Although we have not yet successfully completed this last step, during the past year we have significantly progressed towards a satisfactory resolution. In particular we have found that the analytical structure of the integrals that give the entropy as a function of the area has an interesting behavior that does not exclude the presence of the area quantization observed in numerical calculations.

ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE

During 2008, we have continued with the study of the electronic properties of graphene (one-atom thick carbon layer), which is nowadays one of the materials attracting more attention because of its possible applications for electronic devices. In particular, the research has been focused on the study of the quasiparticle lifetime at low energies and its influence in the transport properties, and also on the electronic structure of hybrid materials made from the junction of graphene and carbon nanotubes.

In the former research activity, we have addressed the question of how large can the lifetime of electronic states be when graphene is close to the charge neutrality point, carrying out an exhaustive analysis of all the sources of decay. The scattering of quasiparticles by acoustic phonons provides an upper bound to the lifetime at very low energies. This channel leads to a decay rate proportional to the square of the quasiparticle energy, with a prefactor given by the ratio between the speed of sound and the Fermi velocity of the electron system. There have been however experimental results pointing at the existence of other sources of scattering which do not follow the expected trend for acoustic phonons, starting from the observed deviations from the linear behaviour of the resistivity at low temperatures. These experimental measures have motivated the investigation of the low-energy excitations and decay channels arising below the scale of the in-plane optical phonons. Thus, we have seen that there is a strong coupling between electron-hole pairs and out-of-plane phonons at the momentum transfer

connecting the two inequivalent Dirac points in graphene. This effect turns out to give rise to a branch of hybrid states with energy below the threshold for the creation of electron-hole pairs. We have also shown that the resulting soft modes provide then the relevant channel for the scattering of quasiparticles, leading to a decay rate proportional to the cube of the energy below the scale of the out-of-plane phonons (≈ 70 meV). Moreover, we have found that the contribution of the hybrid modes to the quasiparticle scattering is progressively switched off as the Fermi level goes away from the charge neutrality point. These results have been consistent with the transport measurements carried out in graphene as a function of the temperature, where it has been seen that the linear regime of the resistivity ends at a scale of the order of ~ 150 K. Our analysis has also determined the existence of a crossover from the decay rate characteristic of the acoustic phonons at very low energies to the enhanced decay arising from the low-energy hybrid states made of out-of-plane phonons and electron-hole pairs. Beyond that, our results offer the possibility of estimating the mean free path in clean graphene samples, showing that there may be coherent transport up to distances well above the micron scale, at quasiparticle energies of the order of several tens of meV.

In the second research activity, we have studied the electronic structure of the junctions between the graphene layer and carbon nanotubes, making use of the numerical diagonalization of tight-binding models as well as the continuum theory based on Dirac fermion fields. The latter provides in particular a unified description of different lattice structures with curvature, which is always localized at six heptagonal carbon rings around each junction. When these are evenly spaced, we have found that it is possible to curve the planar lattice into armchair ($6n,6n$) as well as zig-zag ($6n,0$) nanotubes. Paying attention to the local density of states, it has been possible to show that the junctions fall into two different classes, regarding the low-energy electronic behavior. One of them, constituted by the junctions made of the armchair nanotubes and the zig-zag ($6n,0$) geometries when n is a multiple of 3, is characterized by the presence of a peak very close to the Fermi level in the density of states, which is absent for the rest of the junctions with zig-zag nanotubes. We have seen that, in general, the local density of states tends to be depleted for angular momenta $l \neq 0$, with peaks above and below the Fermi level marking the threshold for the propagation of new states across the junction. The existence of a peak very close to the Fermi level turns out to be the reflection of quasi-bound states of the Dirac equation, which arise as a consequence of the effective magnetic flux induced by an appropriate configuration of the heptagonal rings. On the other hand, we have studied the electronic structure of the arrays of junctions, finding out that these can be also classified into two different groups according to the low-energy behavior. Thus, the arrays made of armchair and ($6n,0$) nanotubes with n equal to a multiple of 3 are characterized by the presence of a series of flat bands, whose number grows with the length of the nanotubes. We have shown that such flat bands have their origin in the existence of states confined to the nanotubes, with little overlap in the region between the junctions, and that correspond in the continuum theory to the formation of standing waves in the mentioned nanotube geometries. In general, we have concluded that the remarkable behavior predicted for these hybrid systems (localization and confinement of states, flat bands) opens good perspectives in the investigation of electronic devices with novel properties, whose development may be determined at last by the progress in the design of these structures (already fabricated by the Fujitsu company) in the laboratory.

2B.2 NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Nuclear Structure studied with stable and exotic nuclei.
- Studies of nuclear structure by β -decay. Decay modes and breakup of nuclear states.
- Spectroscopic studies of light nuclei close to the nuclear drip-lines. Characterization of the nuclear structure by elastic and break-up reactions as well as in beta decay. R&D in detectors and electronics.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Three-body systems in Nuclear Physics.
- Nuclear reactions involving few-body systems.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Physic of the non-crystalline condensed matter.
- Advanced instrumentation.

RESEARCH SUBLINES:

- Halo nuclei.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Lepton-nucleus scattering.

- Gamow Teller transitions in Nuclear Physics, Astrophysics, and Particle Physics.
- Single and double beta decay.
- Three-body systems in the continuum, resonances and energy distributions.
- Two-nucleon radiative capture processes with interest in Nuclear Astrophysics.
- Phase-shifts in nuclear reactions involving three-body systems.
- Exactly solvable models.
- Large scale calculations in low dimensional systems.
- Decoherence and quantum phase transitions.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Physical behavior at nano-scales.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Massive data visualization algorithms at neutron spectroscopy.

TECHNIQUES:

- o Gamma-gamma coincidence, detection of charged particles.
- o Processing of nuclear reactions. Detection in complete kinematics in all particles and fragments emitted in the reactions, their energies as well as emission angles in order to be able to reconstruct the invariant mass. Development of the experimental systems and electronics.
- o Selfconsistent Mean Field Calculation Techniques.
- o Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space. The hyperspherical adiabatic expansion method.
- o Solutions of non linear coupled equations.
- o Density matrix renormalization group and large scale diagonalizations.
- o Neutron scattering.
- o Calorimetric techniques.

RESEARCH ACTIVITIES

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES RELEVANT IN STELLAR NUCLEAR-SYNTHESIS PROCESSES

We have developed techniques that allow us to go deeply into the decay modes of exotic nuclei, and especially to learn about the breakup of unbound states. In the previous annual reports of 2003-2007 we informed about the study in full kinematics of the 3-alpha breakup of the levels of ^{12}C -populated in the β^+ -decay of ^{12}N and β^- -decay of ^{12}B . And the study of the breakup of the low energy levels of ^9Be relevant to the $^4\text{He}(\alpha, n)^9\text{Be}$ reaction rate. This reaction is an alternative to the triple-alpha fusion in neutron-rich stellar scenarios. Along the same research line we have studied the beta decay of ^{11}Li into excited states in ^{11}Be above the thresholds of the $^6\text{He}+\alpha+n$ and $2\alpha+3n$ channels. These studies recreate a miniature multi-fragmentation. Information on ^{11}Be states above the charged particle emission threshold is scarce. In previous studies these channels were described as due to the breakup of two excited states in ^{11}Be at 10.5 and 18.2 MeV. The first state would decay through an intermediate state at 9.5 MeV in ^{10}Be while the latter is directly fragmented into 3 or 5 particles. However, our work suggest that the decay of the 18.2 MeV state, and partly that of the 10.5 MeV state, occur in a sequential process through resonant isotopes of He, reinforcing the idea of an underlying cluster structure in ^{11}Be (Nuc. Phys. A 2008).

A new experiment was performed at ISOLDE, CERN, in September 2007 to confirm these new channels involving isotopes of helium. The experimental system was improved to increase the detection efficiency of charged particles in coincidence. In this way five times more events were registered than in the previous experiment. The new data confirm the sequential decay through ^7He . The reconstruction of the trajectories of the three particles involved has enabled us to identify a new state in ^{11}Be . Besides the study of the angular correlations between charged particles allow for the determination of the spin and parity of the 18.2 MeV state and the new 16 MeV state in ^{11}Be (Phys. Lett. submitted). Furthermore it has been shown that the full kinematic analysis successfully allows for a reliable identification of the beta-delayed triton emission (Eur. J. Phys accepted). This is the Ph.D. work of our FPU fellow Miguel Madurga, whose wording is well advanced.

Complementary to this work we have studied the reaction $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ whose channels through states in ^{12}C and ^9B provide information on excited states not accessible to the beta decay thus a complete picture of the structure of these nuclei can be obtained. This paper is based on experiments conducted at the Nuclear Physics line at the Tandetrón installed in the CMAM, UAM. We took data in two runs in March 2008. The methodology used to

separate the contribution of the different channels is summarized in a technical publication (NIM A, submitted). The analysis is very advanced and is the subject of the Ph.D. work of our I3P-CSIC fellow, Martín Alcorta.

We have launched a new line of research in the CMAM coordinated by Dr. Galaviz and dedicated to the study of the nucleosynthesis of heavy elements, by conducting experiments on radiative capture of alpha particles in heavy nuclei using the activation technique. Initial feasibility tests have been conducted in 2008 with a ^4He beam on a target of ^{197}Au . The successful production of thallium isotopes of interest has led us to build an experimental setup dedicated to this research.

DIPOLE POLARIZABILITY STUDY OF HALO NUCLEI

One of the most important and unexpected discoveries of Nuclear Physics in recent years has been the existence of the neutron halo in some nuclei near or at the drip line. A halo state is basically a threshold effect resulting from the presence of bound states near the continuum. The combination of a small binding energy together with the short-range of nuclear forces allows the nucleon (or a cluster of nucleons) to go far away and to have a non-negligible probability at distances much greater than the normal nuclear radius ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm). We proposed an experimental and theoretical study of the scattering of halo nuclei at energies near the Coulomb barrier. Our aim is to determine the effect of dipole polarizability, i.e., the distortion suffered by the nucleus during the collision due to the strong electric field of the target. This effect should be particularly large for nuclei with halo and should manifest as a reduction of the elastic cross section at large angles. This project is carried out in collaboration with groups from the Universities of Seville and Huelva, with whom we have associated units. First we studied ^6He , see 2006 annual report, and this year we have measured ^{11}Li at TRIUMF (Canada). At the Cyclotron Research Center (CRC) in Louvain-la-Neuve (Belgium) we have studied the behavior of the effective elastic section of ^6He on a ^{208}Pb target at large angles for energies around the Coulomb barrier (PH189 and PH215). By studying the behaviour of the cross section below, near and above the barrier we can check whether the optical model is a useful approximation for halo nuclei, and determine the key aspects of the potential to be used for these exotic systems. The results indicate that the effective elastic sections were partly due to the dipole polarizability ^6He in the Coulomb field (Nucl. Phys A 2008). The Ph.D. work of Diego Escrig deals with this topic and he is at this moment drafting the written work thesis report. Our student Mario Cubero analyzes data from ^{11}Li . A popularization of this experiment and the team can be found at the TRIUMF web page <http://www.triumf.info/?headline=172>.

ISOMER SPECTROSCOPY IN THE ^{132}Sn REGION

During the RISING stopped beam campaign at GSI (Darmstadt, Germany) in 2006 we have been actively involved in a series of experiments dedicated to the search for isomeric states in neutron-rich as well as neutron-deficient exotic nuclei populated in fragmentation reactions at relativistic energies. In particular, we have been responsible for an experiment in which we employed the fragmentation of a ^{136}Xe beam to study neutron-rich isotopes close to the doubly-magic nucleus ^{132}Sn . The highlight of this work has been the first observation of the decay of an isomeric state in the $N=82$ r-process waiting point nucleus ^{130}Cd (Phys. Rev. Lett. 2007). The analysis of the new data with respect to the even-even Cd isotopes $^{126,128,130}\text{Cd}$ as well as ^{131}In (Phys. Rev. C Rapid 2009 and Phys. Lett. B 2009) has been subject of the PhD work of Lucia Cáceres which she defended in October 2008 at the Universidad Autónoma de Madrid.

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENTS USING TRANSIENT FIELD TECHNIQUES

The measurement of the magnetic moments of excited nuclear states is of high interest because they give direct information concerning the structure of the state of interest, i.e. its wave function, and therefore allow for severe tests of different theoretical models. If the state of interest has a short lifetime in the picoseconds range the strong transient fields have to be employed in order to induce a measurable effect during the short interaction time between the magnetic moment and the magnetic field. While such transient field techniques are well established for stable ion beams only very recently first experiments have been realized employing them in combination with radioactive ion beam both at low (ISOL bemas) and high (fragmentation) energy. In 2008 we have been responsible for a g-factor measurement in ^{72}Zn at GANIL (Caen, France) and participated in another two measurements at MSU (USA). Furthermore we prepared two proposals for TF g-factor measurements at REX-ISOLDE which got approved in November 2008. Currently, our PhD student Jennifer Walker is analyzing data obtained in an experiment employing four EUROBALL Cluster detectors (28 Ge crystals) to measure magnetic moments in stable Sn isotopes at GSI, an activity which we will continue in 2009 with a new already approved beamtime.

R&D IN DETECTORS FOR EXPERIMENTAL NUCLEAR PHYSICS

Two independent although related lines of work have been the following. First in connection with the project EURONS (EU Contract n° 506065) the design and construction of an extremely thin De+E telescope for the detection and separation in mass of low energy charged particles, along with a multiplexed electronic readout system that allows for simultaneous analyze of 512 detector channels. The second line of work (FPA2007-62170), within the collaboration FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), consists of the construction and test of a scintillator composed of two crystals (Phoswich). Also, simulations of the behavior of the Phoswich made from 3cm LaBr₃(Ce) + 5cm LaCl₃(Ce). The objective, which was obtained with success, was to separate and to identify the pulses of each individual crystal of the Phoswich in one single readout. The characterization and test of the Phoswich detector has been Vincent Gugliemina's project to finish his graduate studies of Engeniering. He defended orally his work at the Engineering School of Madrid the 17th of November 2008.

NUCLEAR SHAPE TRANSITIONS FROM SELFCONSISTENT CALCULATIONS

The ground states of atomic nuclei are characterized by different equilibrium configurations which correspond to different geometrical shapes. The study of these equilibrium shapes, as well as the transition regions between them, has been the subject of a large number of theoretical and experimental studies. Within the framework of algebraic models (the Interacting Boson Model in Nuclear Physics), the different nuclear shapes are associated with dynamic symmetries that provide a useful tool to describe the nuclear properties since they lead to exactly solvable problems and produce all results for observables in explicit analytic form. The phase shape transitions correspond to the breaking of these dynamic symmetries and they occur as the number of nucleons change in the nucleus. Iachello introduced some years ago, the E(5) and X(5) critical point symmetries, which provide parameter free predictions of excitation spectra and strengths for nuclei at the critical point of a phase shape transition. E(5) is the critical point for transitions between spherical and gamma-unstable nuclei and X(5) corresponds to a transition between spherical and axially deformed nuclei. These symmetries were obtained within the framework of the collective Bohr Hamiltonian under some simplifying approximations. In particular, the potential in the beta degree of freedom is approximated by a simple square well potential and the potential in the gamma-variable by a constant in E(5) and by a harmonic oscillator in X(5). Empirical evidence of these transitional symmetries at the critical points has been observed in several cases such as ¹³⁴Ba for E (5) and ¹⁵²Sm for X (5).

In this work we investigate shape transitions within microscopic models, based on effective interactions between nucleons that provide a unified description of nuclear properties along the nuclear chart. In particular, we study whether the assumptions made on the beta-gamma potentials to construct the point symmetries are justified microscopically. Thus, we study various isotopic chains in which the occurrence of shape transitions has been predicted. For that purpose, we calculate potential energy surfaces from constrained mean field calculations. The theoretical framework is based on both the selfconsistent Hartree-Fock-Bogoliubov approximation with the finite-range and density-dependent Gogny interaction (D1S), and the selfconsistent Hartree-Fock + BCS with short-range density-dependent Skyrme interactions (SLy4) and a zero-range density-dependent interaction in the pairing channel. The role of triaxiality in those nuclei where this degree of freedom could be relevant is also considered and discussed. We finally compare our results with those obtained from relativistic mean-field calculations and discuss their similarities and differences.

SINGLE AND LOW-LYING-STATES DOMINANCE IN TWO-NEUTRINO DOUBLE-BETA DECAY

The Single-State Dominance (SSD) hypothesis establishes that in those two-neutrino double-beta (2nbb) decays where the ground state of the odd-odd intermediate nucleus has spin and parity 1(+) (reachable by a Gamow-Teller transition from the even-even 0(+) nucleus), the transition through it could account for the major part of the 2nbb matrix element. If this conjecture is confirmed, the half-lives for 2nbb decay could be determined from single beta minus and electron capture measurements, experiments which are in principle much easier to carry out than the more elaborated and time-consuming double beta decay experiments. On the theoretical side, the possible realization of the SSD hypothesis for the ground-state to ground-state transitions would lead to a drastic simplification in the theoretical description of the intermediate nucleus, since now only the lowest 1(+) wavefunction has to be calculated. Using a formalism based on a quasiparticle random phase approximation (QRPA) which uses a Skyrme Hartree-Fock plus pairing correlations basis and separable residual spin-isospin interactions, we have calculated the Gamow-Teller strength distributions of the single beta branches as well as the 2nbb matrix elements corresponding to the double beta emitters ¹⁰⁰Mo and ¹¹⁶Cd. With these results we first evaluate to what extent the SSD hypothesis or the more relaxed Low-lying States Dominance is fulfilled. Finally, we extend the analysis to the rest of the observed 2nbb emitters and evaluate the contributions to the half-lives coming from increasing ranges of excitation energy. Our calculations indicate that there are no clear evidences of SSD hypothesis.

CONTINUUM THREE-BODY WAVE FUNCTIONS: RESONANCES, DECAY MODES AND REACTIONS

The hyperspheric adiabatic expansion method was developed during the last years by members of this group in very close collaboration with the Nuclear Physics group at the University of Aarhus (Denmark). The main initial goal was to investigate two-neutron halo nuclei; not only their structure but also high energy fragmentation reactions where such nuclei were involved. Later on, by combining this method and the complex scaling method, the same procedure could also be applied to investigate three-body resonances. This combination opens the door to the investigation of the unbound excited states of halo nuclei (resonances), and in particular to the investigation of their decay modes (direct or sequential). The asymptotic behaviour of the wave function contains the full information about how three-body resonances decay, being possible to determine the contribution from each of the decay modes. The applicability of the method is not limited to halo nuclei. It can actually be used for any system (nuclei, atoms, molecules) for which a three-body description is appropriate. In fact, we have investigated not only ^{11}Li or ^6He , but also ^{17}Ne ($^{15}\text{O}+p+p$), ^5H ($^3\text{H}+n+n$), ^6Li ($\alpha+n+p$), ^6Be ($\alpha+p+p$), ^{12}Be ($^{10}\text{Be}+n+n$), or the excited states of ^{12}C , which can be described as a three- α system.

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

In particular, the most recent works have focused in the following topics: First, we have investigated the resonances in ^{12}C and ^9Be , with special emphasis on the energy distribution of the fragments after decay. We have also investigated in detail the spectrum and the structure of ^{12}Be ($^{10}\text{Be}+n+n$). We have found that the theoretical calculations predict for this nucleus a bound excited 0^- state, which is not known experimentally. Finally, we have derived the cluster sum rules to be fulfilled by the transition strengths when the two-body and the effective three-body potentials depend on the the angular momenta. These strengths are crucial for an accurate calculation of the production rates for the different radiative capture processes.

EXACTLY SOLVABLE MODEL

During 2008 we have made significant advances in the study, generalization and applications of the Richardson-Gaudin (RG) models to several strongly correlated systems. We have extended the RG models to the $\text{so}(6)$ and $\text{so}(8)$ algebras of rank 3 and 4 respectively. The $\text{so}(6)$ RG model describes fermionic systems with 3 intrinsic degrees of freedom that can be associated with the color quantum number or with atoms with 3 hyperfine states. The Hamiltonian of the model is a colorless pairing interaction. The $\text{so}(8)$ RG model represents a proton-neutron pairing Hamiltonian for nucleons with spin and isospin or a monopole plus quadrupole pairing Hamiltonian for atoms with spin 3/2. We studied the polarization phenomena in systems with 3 color atoms by means of the $\text{so}(6)$ RG model that can be simulated with cold atoms in 3 hyperfine states.

We obtained the phase diagram as a function of the polarization and the strength of the interaction, describing the stable regions of the normal phase, the breached superfluid phase and the newfound unbreached superfluid phase. We proposed experiments that could detect these new phases. We have extended previous calculations of the $\text{so}(8)$ RG model to large systems that can model nuclear matter. We have quantified the 4 body correlations that cannot be accounted with mean field techniques and that would give rise to the alpha condensate phase.

LARGE SCALE CALCULATIONS IN LOW DIMENSIONAL SYSTEMS

Strongly correlated models can be simulated experimentally by ultracold atoms trapped in artificial optical lattices. We have at our disposal a very efficient Density Matrix Renormalization Group code to be able to simulate these kinds of models in one dimension. We have modified the code to be able to include inhomogeneous systems, of great experimental relevance due to the confining potential that appears in the optical lattice, and systems with several degrees of freedom in each lattice site, needed for the simulation of ultracold atoms trapped in different hyperfine states. In this context, we have studied the phase of a crystal of trions and how this phase is favoured by the confinement potential in the optical lattice. In systems of atoms in three different hyperfine states with attractive interactions bound states of three atoms that are called trions can form. When the atoms are confined in

an optical lattice these trions effectively repel each other. When the interaction is sufficiently strong, the confining potential stabilizes a crystal phase with one trion localized in one lattice site and surrounded by empty sites.

DECOHERENCE AND QUANTUM PHASE TRANSITIONS

During 2008, we dealt with the study of the relationship between the decoherence suffered by a small system and the presence of critical phenomena in its environment. For this purpose, we connected a single qubit to a large quantum bath, modeled by a bosonic Lipkin Hamiltonian. This system displays many different critical phenomena, like first and second order quantum phase transitions, both in the ground and in some excited states. We restricted ourselves to the second order excited state quantum phase transitions. Relying on large scale numerical calculations (up to 10,000 bosons) and some theoretical approximations, we obtained the following result. When the coupling between the system and the environment leads this one to a critical point, the decoherence induced in the central qubit is maximum and behaves with a critical-like finite size scaling. We think that this is a very important result because of two main reasons, First, it allows one to identify critical phenomena in a large quantum system just by analyzing the behavior of a small system coupled to it. And second, it suggests what kind of environment has to be avoided to maintain the quantum coherence of the system along the time.

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Molecular Physics of atmospheres and plasmas.
- Molecular Fluid Dynamics.
- Laser Spectroscopy
- Theoretical Molecular Physics.

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems.
- Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surface interactions.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Molecular clustering in gas jets.
- Rotational energy transfer coefficients by molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of atmospheric relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular alignment and orientation.

TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Cryogenics
- Stimulated Raman Spectroscopy.
- Raman-Raman double resonance.
- Computational and theoretical methods.

RESEARCH ACTIVITIES

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research consists in both an experimental and a theoretical part. The experimental part is focused on the study of systems of relevance in the atmosphere of Earth, like icy particles, aerosols, ions and radicals, and also of icy particles related to the astrophysical media, such as comet nuclei, interstellar grains and ices in protostellar environments or ice mantles in solar system planets or satellites. The theoretical contribution contains two areas,

one of quantum chemical calculations in support of the experiments, including also predictions of molecular properties, and the other on theoretical processing of molecules on surfaces under the effect of external agents, which can also mimic some of the atmospheric systems mentioned above. More details about this line of research, as well as of the researchers and support personnel that work in it, can be found in our webpage: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm>.

Molecular Physics of Atmospheric and Astrophysical Systems

The experimental work of this sub-line started around 2000, focused on the spectroscopy of nitric acid hydrates, which are known to be relevant constituents of polar stratospheric clouds, where some of the key processes of ozone depletion take place. The study included the synthesis in the laboratory of ices of hydrates of nitric acid and hydrogen chloride, and some interactions of gas phase and solid state systems, together with theoretical simulations of the same species. Around 2006 we initiated the study of a different set of solid systems, analogues of astrophysical objects. Since then, we have prepared ice mixtures of water, carbon dioxide and methanol, which are three of the main constituents of comet nuclei, and studied them using infrared spectroscopy and mass spectrometry. The addition of a new cryostat past year has enabled us to extend our experimental work down to 6 K covering a temperature interval which is very interesting in Astrophysics. In the following paragraphs, we describe in more detail the main contributions achieved during this last year.

We have investigated ice mixtures of CO₂ and H₂O using Fourier Transform Reflection Absorption Infrared (RAIR) and transmission spectroscopy. Mixtures were prepared by sequential deposition or co-deposition of the two components from the gas phase onto an Al plate kept at 90 K inside a low-pressure chamber. Two CO₂ structures were found in most experiments: a crystalline form similar to pure CO₂, which evaporates when warming at 105 K, and a non-crystalline, distorted species which remains embedded into amorphous water after warming. The distorted CO₂ structure is characterized by bandshifts between 5 cm⁻¹ (ν₃) and 10 cm⁻¹ (ν₂) with respect to normal CO₂. When the sequential samples are heated to 140 K, beyond the onset temperature at which water ice undergoes a phase transition, the CO₂ molecules at the pores relocate inside the bulk in a structure similar to that found in co-deposited samples, as deduced by changes in the shape of the CO₂ infrared bands. The specific surface area of the amorphous solid water (ASW) generated was evaluated and compared to previous literature results. In addition, theoretical calculations of a pure CO₂ crystal were performed. The relaxed geometry of the solid and its vibrational spectrum were determined and compared to the experimental results.

In another set of experiments, ices of mixtures of carbon dioxide and methanol have been investigated in a range of temperatures relevant for comets and other astrophysical objects. We have performed temperature programmed desorption measurements and recorded transmission infrared spectra of various types of samples. Again, the presence of two slightly different structures of CO₂ is put into manifest. If the samples are heated above 130 K, the distorted CO₂ sublimates and only the normal structure remains. The latter can stay trapped until the sublimation of crystalline methanol (150 K). CO₂/CH₃OH ices formed by simultaneous deposition admit two orders of magnitude more CO₂ than sequentially deposited ices. The desorption energy of CO₂ from methanol ice, and the specific adsorption surface area of amorphous CH₃OH ice have been determined. Whereas the desorption energy is similar to that of CO₂/H₂O samples, the specific surface of methanol is much smaller than that of ASW. The interaction of CO₂ molecules with water and methanol is similar but ices of CH₃OH are much less porous than ASW. The inclusion of CO₂ into previously formed ices containing these two species would take place preferentially into ASW. However, in processes of simultaneous deposition, methanol ice can admit a larger amount of CO₂ than water ice. In either case, CO₂ does not penetrate into crystalline ice. These findings can have direct relevance to the interpretation of observations from e.g. comet nuclei.

The main results of this line described above are reflected in two publications in 2008 for the CO₂ and H₂O mixtures, and one more on CO₂/CH₃COH, which has been accepted in *Astrophysical Journal* but will be published in 2009.

Kinetics of Cold Plasmas and Studies on Plasma-Surfaces Interactions

Another sub-line of research in our group is dedicated to low temperature plasmas of atmospheric interest, containing species like nitrogen, oxygen, hydrogen, methane and others. These laboratory plasmas allow the investigation of species and processes of likely relevance in the upper layers of the atmospheres of planets and some satellites, and also the appraisal of literature data on ion-molecule reactions of importance in the interstellar medium and in protostellar environments. Kinetic models of the various plasmas are used for the analysis and interpretation of the measured data. This line has also potential applications for plasmas related to industry or nuclear research. Again, in the following paragraphs we describe the main results in this field obtained in the past year.

During 2008, several studies on cold plasmas generated in hollow cathode discharges have been carried out and published. The basic research has been focused on the physical and chemical kinetics of low pressure ionized gases. The applied lines have been made in collaborations with the Plasma-Surface Interaction Group of the Fusion team of CIEMAT and with the Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología (ISOM) of the Universidad Politécnica de Madrid.

The distinct energy distributions of the different ions generated in hollow cathode discharges of atomic and molecular gases, pure or in mixtures, at low pressures, have been analyzed. The measured distributions are mostly determined by the acceleration of ions in the sheath region between the negative glow and the cathode, displaying in general a narrow peak centred at energies close to the anode potential, but with specific features for the distinct ions. The analysis of the energy distributions has provided interesting clues about physicochemical processes within the glow region or in the plasma sheath, and in some cases these distributions have allowed the estimation of the relative abundance of ions with the same mass/charge ratio but different composition. This fact can represent a very useful tool for future analysis of complex plasmas (paper: 10.1002/jms.1388, oral presentation: <http://hdl.handle.net/10261/10430>).

On the other hand, pulsed plasma plumes emerging through a transversal hole in the hollow cathode of a large DC reactor have been studied by emission imaging. The images highlight the transient behavior under particular conditions of these plasma events, when the orifice diameter is comparable to the plasma sheath thickness. They also extend current predictions for RF discharges on the distributions of ions flowing through small apertures, and can be scaled to the presently growing field of microplasmas. The full paper and a video of these emerging plasma plumes can be found in <http://hdl.handle.net/10261/8891>.

In collaboration with CIEMAT, the removal of hard amorphous hydrogenated carbon (a-C:H) films from narrow gaps simulating the macro-brush structures present in controlled fusion devices, of interest for ITER, has been investigated. Films with a thickness of 50-150 nm were generated through plasma assisted chemical vapor deposition (PECVD) in glow discharges of CH₄/He on Si and stainless steel plates. The deposited plates were then arranged to form sandwich structures building narrow gaps and were subject to erosion by exposure to O₂/He plasmas and to thermal oxidation by O₂ and by a NO₂/N₂ (1:1) mixture. In the plasma etching experiments, the deposited layers were only partially removed by the plasma at the side wall gap surfaces, but were efficiently removed at the bottom of the gap. In the thermo-oxidation experiments, the deposited films were effectively and homogeneously removed with oxygen at 670 K and with the NO₂/N₂ mixture at T > 570 K. Moreover, the effect that strong metallic getters have in the carbon removal rate by He/O₂ glow discharges has been addressed. Due to the stringent conditions required for the use of Be (proposed for ITER) in laboratory experiments, Li and Mg have been tested as O getters, the former showing also high H-getter properties. Samples of C/Metal mixtures are produced by introducing the metallic evaporator into the glow discharge deposition chamber, which is kept at room temperature. The film growth and removal rate was monitored *in situ* through laser interferometry and particle balance from the mass spectrometer data. Surface analysis techniques have been applied for the mixed film characterization prior and after the exposure to the oxidizing plasma. It was found that full removal of carbon from the metal/C layers was possible for the plasma conditions used. Rates of similar value to those of pure C films were achieved except for the case of layered deposition, where a decrease in the film etching rate was observed corresponding to the location of the metal layer (DOI: 10.1088/1742-6596/100/6/062025).

In collaboration with ISOM, a review has been published on the characteristics of nitrogen containing plasmas generated in order to produce nitrides and dilute nitrides for microelectronic applications. Moreover, silicon nitride (SiN) thin films have been grown on silicon samples and on AlGaIn/GaN High Electron Mobility Transistors (HEMT) by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition. The SiN coatings have been produced in a RF discharge reactor, employing SiH₄ and NH₃ as precursors, at different electric powers and gas flow ratios. During depositions, the plasmas have been characterized by mass and time resolved quadrupole mass spectrometry, and the depletion ratios of parent gases have been observed. Afterwards, the refractive indexes and growth rates of the films have been analysed by ellipsometry, and their composition, by Fourier Transform Infrared Spectroscopy. The electrical characteristics and frequency responses of these films when deposited on HEMT (where they are just usually employed to passivate these devices against current collapses) have been studied too by means of DC, pulsed currents, and small signal RF measurements. The plasma characteristics for the different deposition conditions have been correlated with the subsequent changes in the properties of the films.

Dynamics and Kinetics of Chemical Reactions

Further studies on the relation between transition state and dynamical properties in elementary reactions have been carried out. The study of the dependence of reactivity on the helicity quantum number, using the cumulative reaction probability formalism, has proven most useful for the demonstration of the differences in the transition state characteristics of the direct type reactions H+H₂ and F+H₂. We are presently working in an extension of the

method to the study of complex-forming systems. Work along this line has been performed in close collaboration with our colleagues of the Universidad Complutense, within the framework of our Chemical Physics “Associated Unit”. In the same context, experimental measurements on the femtosecond transition state imaging in the photodissociation of CH_3I have also been conducted.

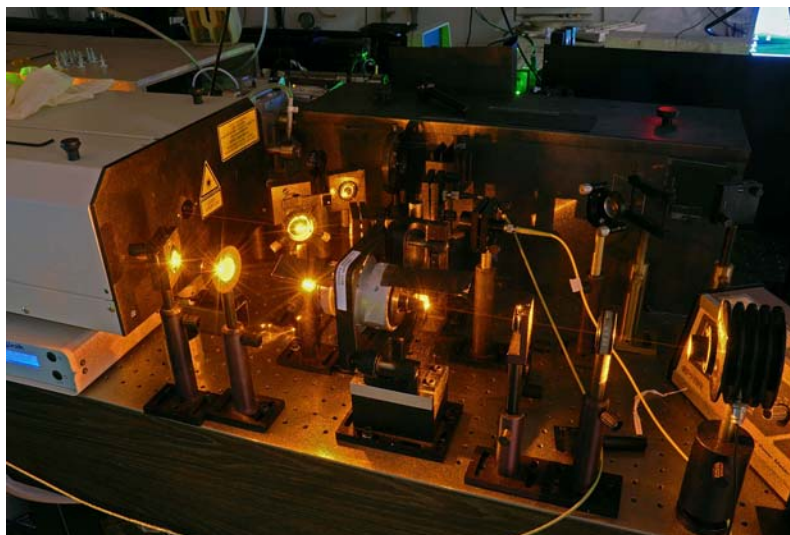
MOLECULAR FLUID DYNAMICS

This research line is focused on the study of gases out of equilibrium in supersonic jets, including phenomena such as clustering, energy transfer by inelastic collisions, and flow field diagnostics.

On the instrumental side, a new closed-cycle He cryocooler, more powerful (16 W at 20 K), has been installed, which allowed to work at lower temperatures (down to 12 K) or higher pressures. This implied, though, the need to redesign the nozzle heating and thermal control. We have installed in the second apparatus two mass flow controllers with high throughput (6 liter/min) to accurately prepare in line gas mixtures to be expanded through slit nozzles, with higher flows than from the circular nozzles used so far. In addition, a device to heat the nozzle up to 200 °C has been mounted, as well as a heated reservoir to expand liquid vapours. With this setup, we have carried out successful tests on jets of H_2O vapour.

We have continued on working on the clustering of molecular hydrogen species by Raman spectroscopy. Series of cryogenic jets of ortho- D_2 have been measured, using a 50 micron nozzle, at source temperatures from 35 to 60 K and pressures from 0.5 to 2 bar. We have recorded the spectral region of the fundamental vibration (2993 cm^{-1}) and of the $\text{S}_1(0)$ rotation-vibration line (3166 cm^{-1}). We have observed the Raman spectra of small D_2 clusters from dimer to pentamer, as well as larger ones, not size-resolved, up to the solid. The $\text{S}_1(0)$ rotation-vibration line of para- H_2 at 4498 cm^{-1} has also been recorded in cryogenic expansions, and new lines of the $(\text{H}_2)_2$ dimer have been observed. Finally, we have studied the clustering kinetics of para- H_2 in pure jets and in mixtures with He, confirmed the role of three-body collisions, and determined for the first time the kinetic coefficient for dimer and trimer formation.

In a different theme, we have measured densities and temperatures in room temperature jets of H_2 , N_2 , and of their mixtures $2\text{H}_2+\text{N}_2$ and H_2+2N_2 . A rather complete picture of thermal and diffusive non-equilibrium processes along and across the jet axis has been obtained, including the normal and barrel shock waves. Finally, we have measured series of para- H_2 jets from nozzles heated at 100 °C. From these data, we intend to determine the state-to-state transfer kinetic coefficients for inelastic collisions in para- H_2 up to 270 K, to extend the temperature range from 120 K, formerly determined in our laboratory.



Laser Spectroscopy Laboratory

LASER SPECTROSCOPY

The collisional broadening measurements in the $\text{C}_2\text{H}_2\text{-H}_2$ system at 143 K have been completed. Simultaneously, and starting from a potential energy surface based on two rigid monomers, the collisional broadening parameters for the Q branch of the ν_2 vibration of C_2H_2 have been calculated in the temperature interval between 77 and 2200 K using the “close-coupling” and “coupled states” approximations. The comparison of the calculated data with the experimental values obtained at 143 K shows good agreement.

In the N_2 - H_2 system, the measurements carried out using stimulated Raman spectroscopy have been used for the determination of the parameters of the energy-corrected sudden model, which in turn has been used to calculate collisional broadening parameters for this system in the temperature interval between 77 and 2000 K. The high-temperature values are of special interest, given their potential use in the field of diagnostics in combustion media.

We have improved and extended the experimental technique, assembled by ourselves during the previous year, for the measurement of collisional rotational energy transfer rates in gas molecules at low densities. The technique is based on the sequential application of two stimulated Raman processes: the first one, doubly pulsed, is used to populate a single rotational level belonging to a previously selected vibrationally excited state. The second one, quasi-continuous, probes the evolution of the recently promoted population at different points in time and in different rotational states, including the initially (optically) populated state and the neighboring ones that receive population through collisional mechanisms. One of the extensions to the technique consists of a pulse compressor based on a stimulated Brillouin scattering shifter, which is able to reduce the temporal width of one of the pump pulses from 12 to 1 ns, thus allowing a more precise definition of the origin of times in the experiment. Another improvement is the replacement of the optical delay line with an electronic one, which allows a much greater flexibility when monitoring the evolution of the rotational populations under study.

A lineshape analysis of the high-resolution stimulated Raman spectra of N_2 recorded in the near nozzle region of a supersonic expansion has been performed in cooperation between several groups of the Department. The study of the initial stages of a jet expansion has a special interest because of the strong density, pressure and temperature gradients present. The validity of the standard isentropic expansion model and off-axis density distribution is not guaranteed in this area. The observed lineshape presents very uncommon features like double peak structures, superposition of Lorentz and Gauss profiles and strong dependence with distance to the nozzle. A highly detailed model has been developed that allows us to conclude that most of the anomalous spectral features can be explained within the standard model when applied to this poorly known region of the expansion. Relevant improvements to the model have been identified and analyzed in a semiquantitative way.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

We have worked in the creation of cyclic states using adiabatic processes. The strategy is similar to the adiabatic creation of eigenstates for time-independent Hamiltonians. In our case the Hamiltonian for a pulse presents a time dependence which is strongly nonadiabatic with respect to molecular rotation. However cyclic states are obtained as projections in the rotational basis set of eigenstates of the Floquet Hamiltonian. We are determining the conditions under which the adiabatic modification of a parameter in the Floquet Hamiltonian gives rise to adiabatic evolution towards a strongly oriented cyclic state.

Our numerical results show that for a large range of parameters the evolution can be done optimally. We have shown that some crossings can be used to convert oriented cyclic states in antioriented states by controlling the intensity of the pulse train.

We have carried out preliminary studies concerning the application of these techniques to the control of the orientation of polar molecules in optical lattices. In this case it is necessary to take into account dipole-dipole interactions among molecules.

2B.4 MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Formation and Evolution of Galaxies.
- Molecular and Infrared Astrophysics.

RESEARCH SUBLINES:

- AGNs and nuclear regions of galaxies.
- Star-forming and interacting galaxies.
- Galaxies at cosmological distances.
- Instrumental developments.
- Molecular spectroscopy.

- Interstellar, circumstellar and extragalactic chemistry.
- Theoretical molecular physics applied to the Astrophysics.

TECHNIQUES:

- o Optical and near-IR integral field spectroscopy.
- o Optical and infrared imaging.
- o Scientific satellites and telescopes.
- o Theoretical molecular physics.
- o Computational methods
- o High level ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITIES

The research activities of the group during 2008 have been focussed on two main complementary areas. On the one hand, the group has actively participated in the developments of instruments for future large international facilities such as the *James Webb Space Telescope* of the American (NASA), European (ESA), and Canadian (CSA) space agencies, and the *Extremely Large European Telescope* (E-ELT) of the European Southern Observatory (ESO). On the other hand, research in the general topic of formation and evolution of galaxies continues, with emphasis in the multifrequency studies of luminous and ultraluminous infrared galaxies.

PARTICIPATION IN INSTRUMENTAL DEVELOPMENTS

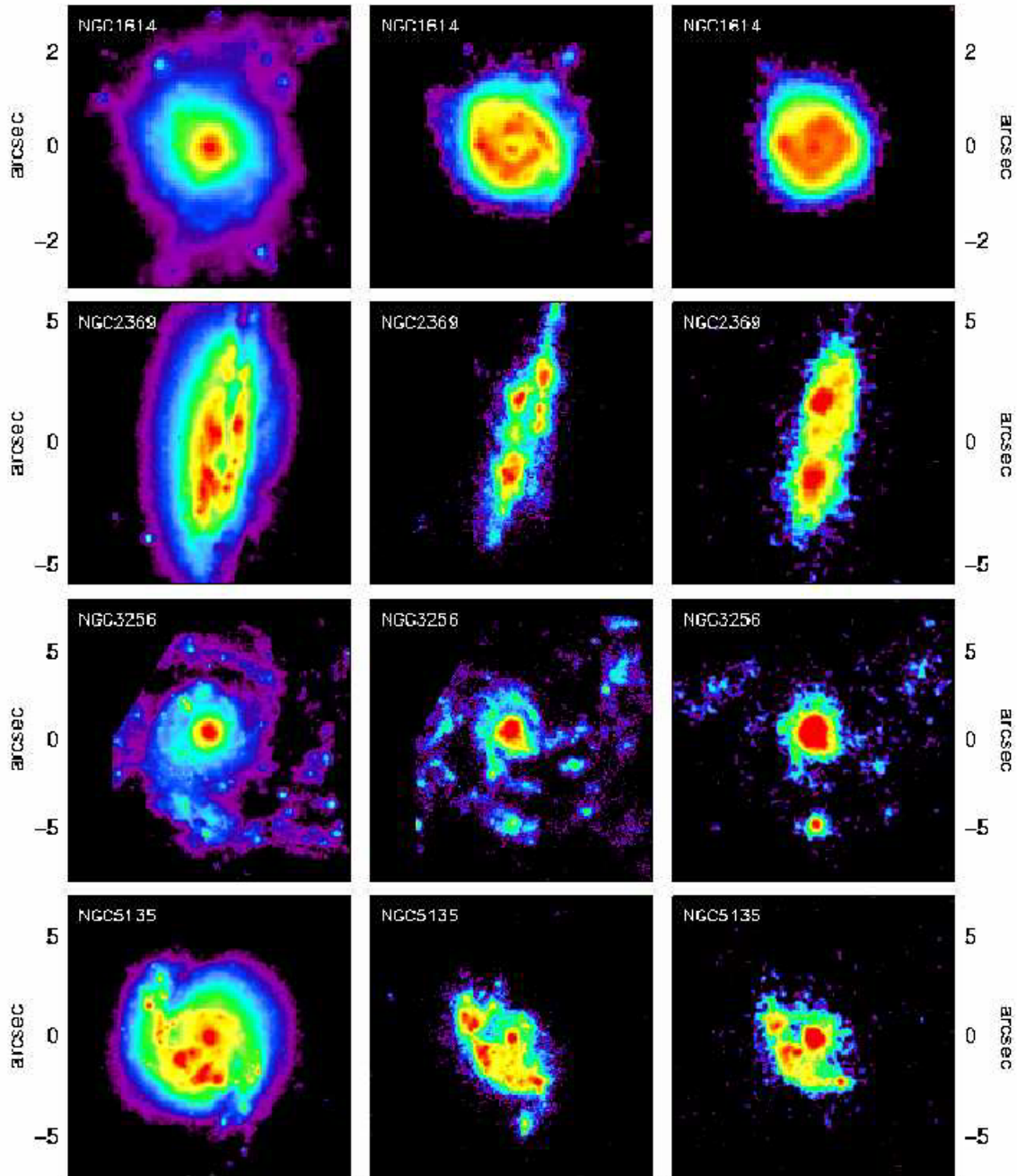
During 2008 we have started the Phase A studies of the instrument HARMONI for the Extremely Large Telescope (ELT) of ESO (European Southern Observatory). DAMIR participates in this phase as a member of a consortium led by the Oxford University (UK), and funded by ESO. In particular, DAMIR participates with three types of studies: i) definition and design of the calibration system of the instrument, ii) a comparative study of the expected performance of HARMONI and other planned major astronomical instruments, with especial emphasis with the JWST instruments, and iii) development of the science case.

DAMIR continues its participation in the mid-infrared instrument (MIRI) and the near-infrared spectrograph (NIRSpec) for the *James Webb Space Telescope* (JWST). During 2008, the group has been involved with all activities of the MIRI Test Team, actively participating in the cryogenic verification of the engineering model of the instrument at the Rutherford Appleton Laboratory. As for NIRSpec, the activities in the frame of NIST (NISpec Instrument Science Team) have continued during 2008.

LIRGs, ULIRGs AND AGNSs IN THE LOCAL UNIVERSE

We continued with our study of the physical and kinematic properties of LIRGs and ULIRGs using optical integral field spectroscopy, as well as high-angular resolution infrared imaging and spectroscopy. We have studied in detail the properties of HII regions in LIRGs using HST and Gemini data (Díaz Santos, Alonso Herrero and Colina). In addition to the publication of this work in the *Astrophysical Journal*, the Gemini Telescope has put out a websplash with the main results, and we have published an article in the "Gemini Focus" magazine.

In collaboration with researchers at the University of Arizona, A. Alonso Herrero has elaborated two proposals for mid-infrared mapping of 14 local LIRGs with the *Spitzer* IRS, which have been approved. Observations by our group have continued during 2008. Miguel Pereira Santaella has started his PhD with the main goal of studying the infrared and X-ray properties of LIRGs, using the NASA *Spitzer* and the ESA XMM-Newton satellites. We presented the first infrared results in a paper submitted to the *Astrophysical Journal* and at the VIII Reunión de la Sociedad Española de Astronomía (Alonso Herrero, Pereira Santaella and Colina).



HST/NICMOS stellar 1.6 μm continuum (left), Paschen_alpha emitting gas (center), and Gemini/T-ReCS hot (8.7 μm or N-band) dust emission images (right) of the central regions of Luminous Infrared Galaxies. The 1.6 μm images trace the distribution of old stars in these galaxies while the Paschen_alpha and hot dust trace stars that have formed in the past ten million years. Full account of the results has been published in Díaz-Santos et al. (2008), and in Gemini web release <http://www.gemini.edu/node/288>.

Almudena Alonso was the PI of a Cycle AO-8 ESA XMM-Newton proposal with 54ks to obtain X-ray observations of a subsample of LIRGs, together with the approved observations in Cycle AO-7. The observations will be made in 2009.

Almudena Alonso was awarded as PI an "ESO/GTC large programme" 20 nights of observing time with the mid-infrared instrument CanariCam on the Gran Telescopio de Canarias. The main goal of this project is to carry out a mid-infrared survey of local AGN. This project is an international collaboration of 20 scientists from the IEM (Alonso Herrero, Colina, Díaz Santos, and Pereira Santaella) and the University of Florida, as well as from

universities and research institutions in the USA, United Kingdom, Germany, Italy and Mexico. The first observations are planned for the Fall of 2009.

We have presented the first results of an optical integral field spectroscopic survey of (U)LIRGs taken with the VIMOS instrument at the VLT (S. Arribas, L. Colina, A. Alonso). The calibration of the data has already been finished (J. Rodriguez) and the analysis of the 2D structure of the stellar and ionised components have been advanced (J. Rodriguez, S. Arribas). Also, through external collaborators (A. Monreal-Ibero), the origin of the ionization in the extranuclear regions of these objects has been investigated. This sample covers the complete luminosity range and morphological types of these galaxies, and therefore it will be possible to investigate in detail their properties as a function of these magnitudes.

A sample of 17 galaxies has been observed with SINFONI, the near-IR Field spectrograph on the VLT, in the H and K bands. The spectral resolution of the instrument is about 3000 (H band), and 4000 (K band). A. Bedregal with L. Colina, A. Alonso Herrero, and S. Arribas continue the detailed physical study of one of these galaxies, NGC 5135. Javier Piqueras has started his PhD work, during which he will investigate the statistical properties of the different components of the interstellar medium of (U)LIRGs using the available SINFONI data.

Finally, D. Miralles and L. Colina continue the analysis of a representative sample of (U)LIRGs, searching for candidates to Tidal Dwarf Galaxies (TDGs) in order to later characterize the stellar population, size and dynamical mass. Interactions and mergers of gas-rich galaxies produce TDGs but it is not known whether or not these galaxies will survive in the near environments around massive galaxies.

LIRsS, ULIRGs AND AGNs AT COSMOLOGICAL DISTANCES

Almudena Alonso, as part of the MIPS science group of the NASA Spitzer Infrared Telescope, continued her work on the properties of distant AGN. In particular, we analyzed the properties of the host galaxies and black holes of typical AGN at intermediate redshifts ($z=1$) in collaboration with scientists from the University of Arizona, the University of Oxford, and the University of Durham. This work was published in the *Astrophysical Journal*. In addition, Almudena Alonso was co-I on Spitzer proposals to study the star formation properties and metallicities of submillimeter galaxies at high- z .

A. Alonso Herrero, S. Arribas, and L. Colina are involved in the international science working groups that are organizing the use of the JWST NIRSpec and MIRI guarantee time for investigations in the general area of formation and evolution of galaxies at high redshift. In particular, S. Arribas in the Spanish PI of the FP7 program ELIXIR, Early Universe Exploration with NIRSpec.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS APPLIED TO ASTROPHYSICAL SYSTEMS

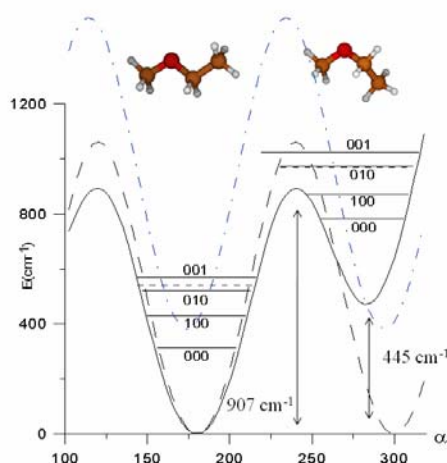
Future spatial missions and new instruments (HERSCHEL, ELT, ALMA) will allow us to describe the physical and chemical properties of molecular clouds with a new sensitivity, producing a large number of spectral lines. Their identification, analysis and interpretation implies the collaboration between astrophysicists and chemists and physicists for modelization and for the analysis of experimental data, collisional processes and chemical reactions.

Recently, more than 150 different molecular species, whose size varies from the diatomics to the *fullerenes* and *PAHs*, have been detected. In this search, Theoretical Molecular Physics can play a very important role because the astrophysical clouds are incessant sources of new species existing at very low pressures and temperatures that can be studied as isolated species. They allow us to perform state-of-the-art ab initio calculations to predict very accurate structures and properties, electronic states, reactivity and formation processes. In the case of unstable species which cannot be treated in the laboratory, theoretical methods represent decisive tools for research. In cases where the species can be experimentally treated, the theoretical methods are useful for understanding their properties, correlating them to their molecular structure and verify assignments.

Our contribution to the science preparation projects of the future instruments is performed within European Networks such as “Molecular Universe”, and in collaboration with the AYA2005-00446 and AYA2008-00702 project teams. We follow three different fields of research, always using Theoretical Molecular Physics methodology. 1) Characterization of the structure of new low stability species, transition frequencies, and excitation coefficients. 2) Determination of line intensities from the collisional coefficients. 3) Kinetic and thermodynamic studies of formation processes.

Many of our results are collected in the astrochemistry base data for their astrophysical employment (Cologne Database for Molecular Spectroscopy - CDMS) BASECOL, UMIST).

a) Characterization of the structure of new low stability species, transition frequencies and excitation coefficients. We always distinguish non-rigid (with various conformers) and semi-rigid molecules (with various isomers) since theoretical techniques requirements are different. High level ab initio calculations allow us to determine Potential Energy Surfaces (PES) for different electronic states and to predict conical intersections, and rovibronic, Renner-Teller, Spin-Orbit, etc., effects. For this purpose, we use the codes MOLPRO, MOLCAS, GAUSSIAN, whose programmers are collaborating with us. Furthermore, we developed our own codes (FIT-ESPEC, ENEDIM) for determining observable properties from the PESs. During the last years, we have made a huge effort for programming codes which allow us to study systems of greater complexity. Many astrophysical species are not well characterized because their instability difficulties laboratory experiments. This is the case of carbon chains (neutral or charged) type C_n , C_nX_y ($X = H, Si$), which are important intermediates in large molecule formation processes. In addition, there are species as ethyl-methyl-ether that are well defined but present incoherencies in the molecular base data for some specific properties. In this case, calculations are useful for understanding the source of the problems and discussing assignments. In this sense, it is worth commenting that ab initio methods are usually more sophisticated than those employed by experimentalists.



FIR spectrum of the ethyl-methyl-ether (Senent et al., J.Chem.Phys)

b) Determination of line intensities from collisional coefficients. The determination of cross sections and rates for non-reactive collisions between the most abundant astrophysical species and H_2 (ortho and para) is necessary for the understanding of line intensities and for further determination of molecular abundances in the astrophysical sources. The coefficients are determined from Van der Waals ab initio PES that are inputs for the molecular dynamics methods (CS e IOS) implemented in MOLSCAT. In collaboration with the Observatories of Paris-Meudon and Grenoble and the University of Tunes el Manar, we have obtained very accurate coefficients for SiO , SO , SO_2 , and C_3 in collision with He and H_2 . Our results are always collected in the BASECOL base data.

c) Kinetic and thermodynamic studies of formation processes. Astrochemists build models containing a large number of chemical reactions for explaining the chemical properties of the sources. Many of these reactions are not suitable for experiments and their kinetic study requires theoretical methodology. Recently, we have started studies of reactions involving many isomers and electronic states for carbon chains (C_4+H) or for species of atmospheric relevance (Mg^++O_2). We predict conical intersections, spin-orbit effects and possible reaction channels.

2B.5 VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Chemical-Physics of deposition and ablation processes.
- Biospectroscopy.
- Surface spectroscopies and surface plasmon photonics.

RESEARCH SUBLINES:

- Ablation induced by IR laser radiation.
- Photochemical processes of nanometric phase deposition.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Surface-enhanced (SEVS) on metal nanostructures.
- Vibrational spectroscopy applied to Cultural Heritage.
- SEVS applied to pollutant detection.
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction.
- Raman of nanotubes.
- Plasmon resonances on metal nanostructures.
- Nanoantennae: Raman and Fluorescence.
- Propagation of surface plasmon polaritons.
- Two-dimensional correlation biospectroscopy.
- Food biospectroscopy.

TECHNIQUES:

- IR Spectroscopy (normal and SEIR).
- Raman Spectroscopy (normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging and SERS).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of twodimensional correlation by H/D isotopic exchange.
- Optical Emission Spectroscopy (OES).
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Theoretical Physics (Classical Electrodynamics) and numerical calculations.

RESEARCH ACTIVITIES

TWO-DIMENSIONAL CORRELATION INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

In this research subline we have employed Raman and infrared spectroscopy to investigate the conformational structure of an HCV RNA 25mer (1-25 nucleotides) in solution. This RNA fragment of hepatitis C virus genome is thought to interact with core protein for nucleocapsid formation, and consequently the structural study of this oligonucleotide is of considerable interest. The spectra were obtained through real time measurement of hydrogen/deuterium exchange with new accessories designed in our laboratory for subsequent analysis by two-dimensional correlation spectroscopy. The principal findings of this study are: (i) The A-form secondary structure involving C3'-endo/anti ribofuranose pucker is predominant; (ii) some uridine and guanosine nucleoside residues adopt the C2'-endo/anti and C3'-endo/syn conformations respectively, which appear in looped nucleotide sequences; (iii) 6 out of 9 guanine residues are base-paired probably forming a stem. These results are interpreted as formation of a hairpin whose secondary structure is consistent with that proposed on the basis of phylogenetic comparisons with other viral RNAs.

STRUCTURE OF BIOLOGICAL SYSTEMS IN FOOD

The research activities of the project funded by the European Union (Project FP6-506359) have been aimed over the last year at studying structural changes in the Fucus AODF (antioxidant dietary fibre) containing formulations, as well as spectroscopic analyses of the major carbohydrate components of this AODF. Newly developed products with Fucus fibre-containing formulations were performed for this task. These were surimi gels (3% AODF) and minced fish (4% AODF) prototypes with their corresponding controls at constant moisture or protein concentrations. In order to explain some functional and sensory properties from a spectroscopy viewpoint, Raman spectra of aqueous dispersions of Fucus fibre at variable humidity were measured. On this basis it was found that the local humidity of the Fucus fibre, as measured by the relative intensity values of the 2937/1529 cm^{-1} bands, was higher than the one corresponding to dispersions of fibre at the average humidity percentage. This could account for the lower water holding capacity of the Fucus containing formulations. On the other hand, the properties of both surimi gels and minced fish products suggest that some polysaccharide components of the Fucus fibre act increasing these texture and rheological values in the products, since this cannot be attributed to protein secondary or tertiary changes.

STUDY OF IR LASER INDUCED ABLATION

We are carrying out ablation process studies in several systems: Biological tissues films (gelatines) and Ni or Co sheets in benzene atmosphere.

In collaboration with the Laser Chemistry Group of the Chemical-Physics Institute, Rocasolano, we have followed with the study of the ablation of biological tissues (gelatines) induced by the IR laser in comparison with the study of the ablation process induced by excimer lasers at 266 and 355 nm. By LIF we have detected the formation of tyrosine in the infrared ablation process of these tissue,s and now we have been able to confirm it by OES in B255 gelatine and in Chitosan. By this technique we have initiated a study of the formation dynamic of this photoproduct. We have seen that in both compounds tyrosine is detected up to the millisecond time range. However, detection in the interval 0-100 μ s has not been possible, indicating either an incubation time for the formation of the photoproduct or an interaction of the newly formed species with the ablation plume.

In collaboration with Prof. J. Pola of the Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic, we carry out a project of ablation of metal sheets in benzene atmosphere to obtain metal nanoparticles embedded in polymer. Along 2008, we have carried out a detailed study by means of OES of the transient species produced in the ablation of Co and Ni sheets in 1 and 5 Torr of benzene. The induced breakdown in 100 Torr of benzene in the absence of metal sheets was also studied for comparison. In all cases, the vibrational temperature of the formed C_2 species was obtained, as well as that of the neutral Co and Ni atoms and excited Ni^+ . The obtained results suggest that the ionized species are formed probably in the inner part of the plume, while the atoms and molecular species are produced in the front region of the plume, where the atomic density is lower. With respect to the solid deposits, preliminary results indicate that they are formed by metallic particles embedded in a carbon polymeric matrix.

PROCESSES OF DEPOSITION OF NANOMETRIC STRUCTURES

Also in collaboration with Prof. J. Pola of the Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic, we have carried out a study of the dissociation of mixtures of germane and trisilane with the aim of detecting the formation in the gaseous phase of SiGe, in the process of IR laser pyrolysis. Solid deposits of this compound have been formed by different techniques in the laboratory of Praga from the IR laser induced breakdown of germane and silane. We have carried out IR multiphoton dissociation at low initial pressure of the parents detecting the possible emission by a system of monochromator and photomultiplier. At higher pressure of the initial compounds, in breakdown experiments the possible emission was investigated by OES by means of a ICCD camera. We have been unable to detect the gaseous phase of SiGe, although we have probed by Raman spectroscopy that it is present in the solid deposit. Simultaneously with this investigation we have carried out a spectroscopic study of the neutral and ionic species emitted in the breakdown of germane, study that had not been performed before.

LASER INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY, LIBS



Plasma formed in the IR Laser Induced Breakdown in N_2 .

We have strengthened the collaboration with Prof. J.J. Camacho of the Physical-Chemistry Department of the Autonomous University of Madrid, which started at the beginning of 2007, by further extending our studies. On the one hand, we have continued with the studies of the formation mechanisms and spectroscopic properties of species formed in gaseous molecules by breakdown induced by our CO_2 lasers. On the other hand, we have initiated the study of the ablation plume produced by these lasers on solid targets. In the first topic, we have

obtained data of the plasmas generate in He and O atmospheres, publishing the results of this second investigation and being in the middle of the publishing phase for the first ones. With respect to the second topic, we have studied the thermic, dynamic and spectroscopic properties of the plume produced on graphite targets, carrying out also a study with spacial resolution of the different species produced in the ablation process. We have obtained, and published, data about the excitation temperature and ionization degree of the plume at different distances from the target surface, as well as the spectroscopic characteristics of the emissions as a function of the pressure of the air background atmosphere and the CO₂ laser irradiance.

PLASMON RESONANCES ON METAL NANOSTRUCTURES: SEF AND SERS

We have extended the fruitful theoretical and numerical ongoing research on light scattering and plasmon resonance excitation on metal nanostructures called nanoantennas. In particular, the plasmon resonances of trimers of nanoparticles of various shapes have been characterized, with special emphasis on the fluorescence enhancement of single molecules located a few nanometers away from such nanoantennas. Whereas trimers do not provide any advantage compared to dimers, in SERS enhancement factors, they can indeed be especially adequate for SEF. This stems from the fact that they do exhibit various plasmon resonances at different frequencies that can be exploited to yield a twofold fluorescence enhancement: at both the pump and the emission frequency. As a proof of principle, calculations have been carried out to determine *scattering* spectra of the optically coupled nanotrimers, along with the radiative and non-radiative decay rates (and quantum efficiency) of a single molecule placed in the nanotrimer gaps at nanometer distances.

NANOFABRICATION OF METAL NANOPARTICLES

One of the main basic researches in our Group is the development of innovative methods of fabrication of metal nanoparticles, with interesting optoelectronic properties to be applied as LSPR (Localized Surface Plasmon Resonance) substrates in SERS (Surface-Enhanced Raman Scattering), SEIRA (Surface-Enhanced IR Absorption) and SEF (Surface-Enhanced Fluorescence) Spectroscopy. Most attention was devoted to the preparation of metal nanoparticles due to their highest LSPR activity.

Laser photoreduction by radiolysis was developed in the last years in our laboratory for the in-situ trace analysis of molecules of different nature. A method was developed for the in-situ reduction by laser of Ag⁺ ions in solid-liquid interfaces by improving the experimental conditions, i.e. laser power and metal concentration. This method leads to the analysis of pigments of interest for the Cultural Heritage on the corresponding materials without a previous extraction of these compounds. This technique was employed for instance for the analysis of flavonoids on silk and wool.

A method to obtain silver colloids by a radiolytic method was developed. Ag nanoparticles were successfully prepared by γ -radiolysis of Ag⁺ aqueous solution containing *t*-BuOH or *i*-PrOH at room temperature without the addition of aggregating or stabilizing substances. The metal colloids were characterized by UV/Vis spectroscopy and Scanning Electron Microscopy. Many experimental conditions were tested (i.e. Ag⁺ concentration, dose and •OH scavenger alcohol) in order to obtain the best controlled size of nanoparticles as well as the high stability of colloidal silver with time. The use of relatively low irradiation doses and Ag⁺ concentrations are allowed to obtain very stable suspensions of Ag nanoparticles without adding any colloid stabiliser, a source of further spurious bands in the Raman spectra. The suitability of the γ -irradiated colloids in SERS spectroscopy was tested by using thiram, a known fungicide. Micro-SERS and SERS spectra of good quality were achieved at very low concentration of adsorbate, without the overlapping of impurities normally present in conventional citrate colloidal suspensions of Ag nanoparticles. This work was developed in collaboration with the Group of Dra. Armida Torreggiani from ISOF/CNR (Bologna, Italia), because it was necessary to use the experimental facilities existing in that institute ("gamma cell" and the LINAC, linear accelerator of particles). This work led to the publication of an article in the journal Colloid and Surfaces Part A and another in Physical Chemistry Chemical Physics.

Another research line of interest was the preparation of bimetallic nanoparticles by coating colloidal gold nanoparticles in solution with a very thin shell of silver. The resulting bimetallic Au/Ag system preserves the optical properties of gold but shows the chemical surface affinity of silver. The effectiveness of the coating method, as well as the progressive silver enrichment of the outermost part of the Au nanoparticles, have been monitored through the SERS spectra of several species (chloride, luteolin, thiophenol, and lucigenine) which show a different behavior on gold and silver surfaces. A model on the growing of the Ag shell was proposed on the basis of the spectroscopic and microscopic data consisting in the formation and deposit of Ag clusters on the Au NP surface.

METAL SURFACE FUNCTIONALIZATION AND NANOSENSOR DESIGN

A crucial point in the application of these surface techniques is the adsorbate nature. Usually, the active molecules in SERS and SEIRA show some affinity for the metal surface in order to ensure a necessary approach to the surface as to undergo a significant vibrational enhancement. However, many molecules are adsorbed so strongly on the surface that can undergo a chemical change, as we have seen for many polyphenols. In contrast, many other molecules are not capable to approach the metal surface due to their poor affinity to the metal. Among them, the Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) and Polychlorinated Pesticides (PCPs), considered as hazardous pollutants, on whose detection using enhanced vibrational techniques we are specially interested.

The affinity of adsorbates toward the metal surface is highly affected by the nature of the metal interface. In the case of metal nanostructures, the interface is negatively charged, the negative potential or zeta potential value depending on the method employed to prepare the nanostructures. This means that positively charged adsorbates will present the most enhanced vibrational spectra due to their high preference to adsorb onto the surface. The high polar nature of the interface makes difficult the adsorption of highly apolar molecules such as the PAHs mentioned above and many apolar pesticides, whose detection in trace quantities is of tremendous interest.

But the affinity of the adsorbate toward the metal can be increased by modifying the chemistry of the interface by a proper functionalization of the metal NPs. In the last years we have also devoted much attention to the modification of surface metal NPs by the adsorption of molecules displaying a double functionalization, i.e. a high affinity to the metal and to the ligand.

Referring to designed hosts, we have found that calixarenes can be successfully used in the molecular recognition of PAHs by SERS. Calixarenes are a class of synthetic cyclo-oligomers formed via a phenol-formaldehyde condensation. They exist in a “cup” like shape with a defined upper and lower rim and a central annulus. Calixarenes have interesting applications as host molecules as a result of their preformed cavities. By changing the chemical groups of the upper and/or lower rim it is possible to prepare different derivatives with differing selectivities for various guest ions and molecules. Adsorption and self-assembled monolayer formation of calixarenes is a prerequisite for the application of calixarenes in sensor devices.

This year we reported the synthesis of a dithiocarbamate (DT) functionalized calixarene aimed to improve the affinity of the calixarene host toward the NP surface. DT is able to strongly interact with the surface of metals by forming chelate complexes. As a consequence, the use of the dithiocarbamate calixarene (DTCX) as host leads to an increase of the sensitivity of the sensing system which, in turn, allows performing a quantitative study of the PAHs detection (whereas the previous ones were mainly qualitative). Furthermore, the DT bands are much more sensitive to the different interaction with the metal surface than the ester ones probed in previous works. Therefore, this group provides molecular marker bands which can be used to better interpret the structural changes occurring in DTCX upon interaction with the metal. Finally, by using the DTCX-nanoparticle system it was possible to perform the SERS detection of PAHs directly in the Ag nanoparticle suspension in water, which was not possible in Ag nanoparticles functionalized with other kind of calixarenes. Thus, the combination of the good host properties of calixarenes and the high affinity of the DT group in the same molecule, self-assembled on a nanostructured metal, could be a good strategy to design new sensitive and selective surfaces for the detection of PAHs. The effectiveness of such a system is evaluated in the present work.

Other kind of host molecules probed during 2008, which has rendered good results in the functionalization of the metal surface and the detection of PAHs, were viologen dications (VGDs). VGD species join together different properties of interest which make them a promising group of hosts for POPs detection. In fact, they are electron acceptors, thus able to interact strongly with the metal surface and able to form charge-transfer complexes with electron donor species such as PAHs. The hosting capability of VGDs is due to the repulsion between the positive charges of these dications, which influences their self-organization on the surface, generating the formation of intermolecular cavities. Furthermore, their bifunctional nature makes VGDs able to induce the formation of hot spots (HS). The VGDs paraquat (PQ), diquat (DQ) and lucigenin (LG) were assayed in this work in order to accomplish a comparative study between them in what concern the detection ability against PAHs. However the detection of PCPs was more difficult.

To improve the detection of PCPs we have functionalised silver nanoparticles with α,ω -aliphatic diamines. These bifunctional diamines can act as linkers of metal nanoparticles inducing the formation of interparticle junctions or gaps between metal NPs leading to HS. In addition, the dicationic nature of these diamines leads to the formation of cavities just at the induced hot spots which can be applied in molecular recognition of analytes. The influence of the surface coverage and the aliphatic chain length in diamines on their self-assembly was tested by the vibrational spectra and correlated to the different plasmon resonances of the dimers detected in the extinction spectra. These factors can be used for tuning the plasmon resonance of dimers formed by two metal nanoparticle where

interparticle hot spots are formed. Finally, the functionalized Ag nanoparticles were applied in the trace detection of PCPs.

SURFACE-ENHANCED FLUORESCENCE (SEF)

During the last year Surface-Enhanced Fluorescence (SEF) was applied to study the ionization, aggregation and adsorption onto the metal surface of the antitumoral drug hypericin (Hyp). Hyp is able to interact with Ag nanoparticles following different mechanism depending on the ionization state of the drug. The monoanionic Hyp can homoassociate giving rise to H-aggregates which render an intense SEF emission, in contrast to what usually occurs in solution, where the fluorescence is quenched. At a pH below 6.0, the neutral Hyp species exist under the 1,6-dioxo tautomer on the metal surface. This tautomer is able to form J-aggregates by intermolecular H-bonds, giving rise to molecular networks which can be adsorbed on the metal surface oriented parallel to this surface. In this case the SEF enhancement is lower due to this parallel orientation. The SERS spectra were very important to calculate the different ionization pK of Hyp on the surface, and to obtain structural information which served to understand key physico-chemical processes undergone by Hyp, such as the isomerization, intermolecular interaction and the orientation on the surface. We have also employed silver nanoparticles to characterize the adsorption of another antitumoral drug, emodin, at different pH's, in solution and on glass slide. The self-association of the drug, owing to strong intermolecular van der Waals-like attractive forces between the molecules, exhibits distinct changes in the absorption bands according to the aggregation patterns. The obtained results indicate that either in solution or on a glass, substrate surface enhanced fluorescence appears at neutral pH's whereas at basic ones quenching of the fluorescence due to the short distance between emodin and silver particles is principally observed. Fluorescence lifetime has also been measured and a reduced lifetime for emodin molecules near to nanoparticles was observed as compared to the emodin solved in pure water, corroborating the results obtained in fluorescence emission spectra.

SENSING SPORT DOPING DRUGS BY LOCALIZED SURFACE PLASMON NANOSENSORS

A new research line consisting in the application of SERS spectroscopy to the analysis and detection of sport doping drugs (SDD) was implemented. This new line was motivated by several reasons: the lack of works dealing with the application of vibrational techniques in the characterization of SDDs, despite of their great importance and social impact and on the health of sportmen and sportwomen, the need for the development of highly sensitive and selective methods for the detection of SDDs in physiological media (blood, tears, saliva, urine, etc.) and the growing demand imposed by the new legislation (Ley Orgánica 7/2006, November 21). We have started this new line by carrying out a basic vibrational characterization of SDDs selected on the basis of their use frequency, and the effect on the user's health. In particular, this includes a group of drugs such as anabolizants (nandrolone, clenbuterol), the masking agent probenecid, and the beta-blocker propranolol. The first vibrational spectra of these substances were obtained at low concentrations, and functionalization methods of nanoparticles were probed in order to selectively detect these drugs.

LASER TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY AND PRESERVATION OF CULTURAL HERITAGE

We have continued with the application of SERS spectroscopy to the analysis of polyphenolic pigments flavonoids. This study was extended to the characterization of related compounds with different OH groups in order to find a good structure-to-vibrational spectra correlation. These molecules have been traditionally employed as dyestuffs of historical tissues, together to their biological properties as natural antioxidants. In spite of their importance, there are few vibrational studies of these molecules due to their high fluorescence and their relative poor stability. In this sense, the structural modification of Quercetin (QUC), one of the most common dietary flavonols also used as dye, was investigated at alkaline pH and in the presence of metal ions. The parallel analysis of the Raman, Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS), and the UV-Vis spectra allowed to demonstrate that the interaction of QUC with Zn(II), Cu(II), or Ag(I) ions can result in the formation of complexes and/or the oxidation of the molecule. The catechol group in the B-ring resulted to be important both for metal chelation and in oxidation processes. In fact, the conversion of this reactive group to *o*-quinone is the first step of the QUC oxidizing processes which are strongly affected by pH both in the absence and presence of metal ions.

Last year a new line consisting in the application of SERS, SEIRA, and SEF spectroscopy to the study of synthetic contemporary dyes and pigments was started. In particular, quinacridone, quinacridone, quinone, and their derivatives have been thoroughly characterized by normal Raman, UV-vis absorption, and fluorescence. The low solubility of these compounds leads to the use of cavitands to induce their solubility or their dispersion in aqueous media. The first Raman spectra of these molecules were obtained, what will permit the identification of these pigments in the commercial media where they are normally dispersed.

Finally, in relation to the the Cultural Heritage preservation and characterization, we have continued with the application of the Raman spectroscopy to the characterization of construction materials. In particular, to the study of the degradation of mortars and concretes by the formation of thaumasite and the generation of calcium carbonate on metallic electrodes.

SURFACE-PLASMON POLARITON EXCITATION BY SEMICONDUCTING NANOWIRES

Theoretical studies (based on both the reduced Rayleigh equations and Green's theorem surface integral equations) have been carried out on the propagation and scattering of surface-plasmon polaritons (SPP, surface EM waves resulting from a blend of grazing photons and electron plasma oscillations), in the visible and IR on metallic surfaces with submicron defects, of enormous interest in Nano-Optics. In particular, as a joint venture with Dr. Jaime Gómez Rivas and colleagues at the *FOM-Institute AMOLF (Amsterdam)* and *Philips Research Labs (Eindhoven)*, experimental measurements have been confirmed and interpreted revealing SPP excitation by InP nanowire photoluminescence, stemming from the confocal microscopy data that indirectly manifest the SPP excitation, propagation, and subsequent scattering by a gold bullseye grating.

On the other hand, classical optics phenomena such as the Talbot effect and the formation of caustics have been formally investigated in the case of quasi-2D waves like SPP, proposing schemes to experimentally observe such analogues and showing expected results.

2B.6 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Simulation of polymer reactions and of physical properties of polymers.
- Physical properties and nanostructure of polymers.
- Polymer Physics: Order and mobility in macromolecular systems.
- Application of the synchrotron light to the study of polymers and nanostructured materials.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

- Nanostructure of polymer thin films.
- Polymer nanocomposites: Structure and physical properties.
- Confined structure and dynamics in Soft Matter.
- Conformation of biological Soft Matter: Membrane protein solutions.
- Microdeformation processes, relation to the nanostructure and optimization of the mechanical properties.
- Early stages of polymer crystallization under shear deformation.
- Nanostructure of multilayer materials by means of Ultra Small Angle X-ray scattering.
- Structure development and properties of natural polymers and nanocomposites.
- Recrystallization processes in semirigid systems.
- Pre-crystallization phenomena, crystallization and phase transitions in synthetic and natural polymers.
- Synthesis of functionalized polyolefins.
- 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 processes in polyolefin blends.
- Molecular dynamics and dielectric properties.
- Structure-dynamics -relationships in soft and polymeric condensed matter.
- Biophysics.

TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidence (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy, Scanning electronic microscopy.

- o Raman Spectroscopy.
- o Micro and nano hardness.
- o Neutron Scattering.
- o Broad band dielectric spectroscopy.
- o Shear Rheometry with continuous dynamic torsion.
- o Capilar extrusion rheometry.
- o Dynamic mechanical analysis under flexion.
- o Dynamic mechanical analysis under traction: elastic modulus.
- o Analysis by crystallization temperatura fractioning.
- o Optical microscopy and Atomic force microscopy.
- o GPC and multi light scattering at high tempertures.

RESEARCH ACTIVITIES

NOVEL NI-BASED CATALYST FOR COPOLYMERIZATION OF POLAR MONOMERS AND OLEFINS

We have performed a theoretical study about the ability of certain N-oxide iminopyridine Ni catalysts to copolymerize methylacrylate and ethylene. This work has been done in collaboration with Prof. Campora's group at the University of Seville, where they synthesized the catalysts and performed the polymerizations. The initial experimental results were not very clear about polar monomer incorporation in a methyl substituted iminopyridine catalyst. Our theoretical calculations pointed out the catalyst capability to copolymerize methylacrylate and ethylene. These results encouraged the execution of new experiments, which finally confirmed the methyl substituted N-oxide iminopyridine Ni complex as an adequate catalyst for polar monomer and olefin polymerization.

IRON BASED CATALYSTS FOR OLEFIN POLYMERIZATION

We have carried out a theoretical study of the reactivity of different active species associated to a Fe-based bis-iminopyridine catalyst. There is a controversy about the nature of the active species. The metal oxidation state is one main point of debate. Our previous calculations using Conceptual Density Functional Theory descriptors of reactivity showed the ability of Fe(III) species to promote olefin polymerization. In the new work, we show that Fe(III) is more reactive and produces lower polymer molecular weights than the Fe(II) complex. These results are in agreement with experimental observations regarding the existence of two components in the resulting molecular weight distribution. Moreover, kinetic studies have shown that the lower molecular weight fraction is produced at the beginning of the polymerization reaction. Our calculations suggest that the Fe(III) species produces the earlier low molecular weight polymer and can be subsequently reduced to Fe(II) in the reducing reaction conditions.

SIMULATION OF CB1 AND CB2 CANNABINOID RECEPTORS

We have studied the structure of the CB1 and CB2 cannabinoid receptors, in collaboration with Dr. Paez's group of the Instituto de Química Médica (IQM). These receptors are involved in several biological processes regarding both the Central Nervous and the Immune Systems. The main hypothesis about the bioactivity of these receptors suggests the presence of two structural forms, namely, one inactive and another inactive. These structures have not been determined to date. Some models have been built by homology starting from a homologous protein, bovine rhodopsin, for which a crystallographically determined structure exists. We have performed simulations on CB1 and CB2 receptors taking into account a water solvent box. The CB1 and CB2 initial models were provided by the IQM group, who obtained the inactive structures by homology with the rhodopsin molecule. Our simulation results show several differences in the dynamic behaviour of each receptor. This can give additional information about the ligand selectivity experimentally found for CB1 and CB2.

EARLY CRYSTALLIZATION STAGES OF SHORT CHAIN BRANCHED POLYETHYLENE MODELS

Recently, the crystallization of linear polymers from dilute solutions and melt by molecular dynamics simulations has been studied. However, the important issue of the role of the short chain branches (SCB) on the nucleation stage has not been adequately addressed. In order to monitor how the chain segments orient with respect to each other a global order parameter (S) is defined. At high temperatures ($T^* \sim 13.3-12.5$) the S parameter is near zero for all systems which means that there is not an ordered global orientation, i.e., the chain remains in a random coil configuration. At temperatures lower than $T^* \sim 12.5$, the S parameter increases as the temperature decreases, indicating that the global bond-orientational order grows. The growth rate of the bond-orientational order shows a dependence on the branch content, decreasing in value as the number of branches increases. At very low

temperatures, a plateau for the S parameter between 0.65-0.80 is reached. The rate of the global ordering process is shifted to low temperatures as the branch content increases. This peak can be assumed as a crystallization temperature, which decreases as the number of co-units increases in agreement with experimental data. One can observe that the development of the order is different from PE-00 and PE-10 systems. In the PE-00 the formation of parallel stems is evident at $T^*=10.6$, by further cooling steps an increase in the lamella thickness is observed. On the contrary, the system PE-10 forms smaller parallel stems at similar T^* while the branches seem to be migrated to the folding surface. Once the branches are placed in the folding surface, a growth of the parallel stems is observed (lamellar thickening). A total exclusion of the branches from the crystal structure can be deduced from the molecular simulations.

COMPUTER SIMULATIONS AND EXPERIMENTS TO OBTAIN THE ENTANGLEMENT FEATURES IN LINEAR AND BRANCHED POLYETHYLENE

Combined computer simulations and experiments have been carried out in order to describe the linear viscoelastic properties and molecular dynamics of linear and branched polyethylene. We have performed for the first time a full atomistic molecular simulation of the dynamics of different model of polyethylene to obtain entanglement features as the molecular weight between entanglements (M_e) and the related entanglement relaxation time (τ_e). The combination of the advanced simulation technologies with the experiments in the melt state have allowed us to obtain molecular features not available experimentally, and to explain the melt linear viscoelastic response and the evolution of the monomeric coordinates obtained from incoherent neutron scattering.

PHYSICAL PROPERTIES OF MOLECULAR MODELS: CATALYST STRUCTURE AND MOLECULAR TOPOLOGY (PROYECTOS COMOCOMO AND CICYT)

We have performed a basic study focused on the properties of molecular models obtained from single-site catalyst based on palladium (Pd) and dual catalysts systems. Pd catalysts are able to control the topology of the polymers to give completely linear to hiperbranched or dendritic systems. We have studied these systems in collaboration with the University of Sevilla. The possibility to incorporate polar comonomers is of great interest, in order to obtain materials with specific properties such as processability, adhesion and compatibility with biological systems. The materials show a unique viscoelastic fingerprint, linked to the presence of branched molecules and a very high concentration of short and long chain branches. Dual catalyst systems are able to generate processable polymers with good mechanical properties. In what these polymers concerns, it has been detected an interesting effect of the presence of hydrogen in the reaction medium. It is found that the presence of hydrogen gives rise to a systematic increase in products molecular weight and polydispersity index, due to the formation of high molecular weight species. This result has been explained also by means of our computer simulations. In addition, a new family of materials has been obtained that will allow us to explore new molecular features-properties relationships.

PROPERTIES OF POLYOLEFINES/CARBON NANOTUBES COMPOSITES (COLABORATION WITH USB)

We have studied the morphology and physical properties of polyethylene/carbon nanotubes composited in collaboration with the University Simón Bolívar (Venezuela). These composites are characterized by lower values of the viscosity and the shear modulus than the pure polyethylene. This behavior has been attributed to the selective adsorption of a fraction (that with the highest molecular weight or relaxation time) of the polymer chains to the carbon nanotubes. The adsorption process promotes that this fraction of molecules to be inactive (unentangled) with the matrix, remaining immobilized onto the surface of the nanotubes and not contributing to the viscosity or the average relaxation time of the system. Some interesting phenomena in processing have been observed: (i) lower values of the shear stress in extrusion and a delay of the distortion regimes; (ii) an improved dimensional stability of the materials after processing; (iii) lower values of the melt strength, draw ratio and viscosity in elongational flow; and (iv) enhanced crystallization kinetics probed by rheometry and DSC, suggesting that the CNT act as nucleating agents for polymeric chains.

COLLABORATION WITH THE INDUSTRY: NEW MATERIALS WITH SPECIFIC PROPERTIES

We have continued our collaboration with industries in the sector of polymeric materials: Dow Chemicals and Repsol-YPF. In this context we have carried out an important activity in the transfer of knowledge to the industry for the development of new materials with specific properties in processing applications for pipes, films and fibers. Two PhD students (Jon Otegui de la Fuente and Nuria Robledo Alvaro) have been involved in the projects, in order to study the properties of processable materials with good mechanical properties and also the morphology, optical and mechanical properties of bi-oriented films. The members of the group have participated in periodical meetings with Repsol-YPF research team (Vicente Hernández, Carlos Martín) and Dow Chemicals research team (Felip Vidiella, Jesús Nieto).

CONFINED DYNAMICS IN SOFT CONDENSED MATTER

Macromolecules under confinement at a nanometer scale (similar to the size of molecules themselves) exhibit non-trivial structure and dynamics, as their physical properties depend on the size of the specimen itself. For example, some "solid" macromolecules become "liquid" if confined into a thin film (others become "harder"). Among the different methods of confinement, our group is working mainly in three:

- The inclusion of nanoparticles in a macromolecular system results in "bulk" confinement, as the macromolecules become jammed between solid particles. Understanding how the properties of macromolecules change under confinement is crucial for the development of nanotechnology, which relies heavily on "soft" matter. In this project, we are working to elucidate how the structure, dynamics and physical properties of macromolecules change in confinement. This investigation requires a combination of experimental techniques, including X-ray and neutron scattering, dielectric spectroscopy, calorimetry as well as atomic force microscopy and Raman spectroscopy.
- Infiltration of polymer chains into porous materials. By means of X-ray scattering and dielectric spectroscopy we have investigated the confined structure and dynamics in model polymer systems, and we have observed that the counterbalance between spatial confinement and interfacial interactions controls, at the nanometer level, the dynamic and semicrystalline structure of the polymer.
- Thin polymer films. We have developed the know-how for the preparation of thin films with thicknesses in the range of 10 to several hundred nanometers. The goal is to explore the nanostructure and dynamics of the polymer chains in the confinement imposed by this geometry. On one hand, the knowledge of the mechanism and the underlying forces evolved in a dewetting pattern would enable us to predict stability conditions for practical use. On the other hand, thin polymer films introduce one-dimensional spatial confinement that affects the polymer crystallization behavior.

Our findings will contribute to the full exploitation of these novel materials in confinement for diverse nanotechnology applications.

STRUCTURE DYNAMICS RELATIONSHIPS IN SOFT CONDENSED MATTER

We have continued with the experimental research line designed to obtain both structural information by X-ray scattering, and dynamic by means of dielectric spectroscopy, simultaneously during ordering processes in polymers. To perform these experiments we have used synchrotron light at the Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) in Hamburg, Germany and the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble, France. In particular we have investigated the development of a crystalline structure in samples such as aromatic polyesters poly(trimethylterephthalate) (PPT) in a broad spectrum of frequencies. The results have helped to understand the mechanism of crystallization and its influence on the dynamics of the amorphous chains. In this field, we have also begun a project to observe the dynamic changes in the glass for systems with different crystallinity. These experiments were performed using quasielastic neutron scattering at the Institute Laue Langevin (Grenoble, France).

POLYMER NANOCOMPOSITES BASED ON CARBON NANOTUBES AND NANOFIBERS

Continuing the work of our group on nanocomposites of technological interest, we have investigated the conduction mechanisms in a number of systems using a commodity polymer matrix, such as polyethylene, loaded with carbon based nanoadditives, in particular, nanofibers and nanotubes. For that, we have made a study of the dependence of the conductivity on the frequency and the load and the type of nanoadditive. We have also studied the nanostructure of nanocomposites based on aromatic polyesters and single wall carbon nanotubes (SWCNT), in quiescent conditions and under shear fields with the aim of establishing relationships between the nanostructure and the physical properties of such systems.

BIOPHYSICS: CONFORMATION OF THE MEMBRANE PROTEIN INTEGRINE A2BBIII

By using X ray and neutron scattering techniques it is possible to obtain information on the conformation of biological systems, such as proteins in solution. By neutron scattering at low angle, taking advantage of the possibility of tuning the choice of the contrast between the solvent and protein, experiments are underway to obtain information on the conformations of the protein integrin $\alpha_{2b}\beta_{III}$ dissolved in a micelle, trying to mimic the conformation of the protein when is inserted into the cell membrane. The results can provide some clues about the role and mechanism of action of this protein.

STUDY OF THE MECHANICAL PROPERTIES OF NANOCOMPOSITES BASED ON A TRIBLOCK COPOLYMER AND ORGANOMODIFIED LAYERED SILICATES

The nanocomposites were prepared by solution casting followed by melt shearing. The dispersion of the nanofiller in the polymer matrix and its influence on the mechanical behaviour of the composites were determined by means of different microscopic techniques, tensile testing, dynamic mechanical analysis, and microindentation hardness measurements. It was found that the procedure used for the composite preparation was suitable to obtain optimum dispersion of the nanofiller. A significant improvement in the Young's modulus was observed at a filler content of 10 wt% while the other tensile properties remained unchanged. As demonstrated by microhardness measurements, the mechanical reinforcement was verified by a parallel increase in hardness with increasing filler content.

COMPARATIVE EVALUATION OF THE MULTILAYERED STRUCTURE IN PET/PC FILMS BY MEANS OF USAXS AND AFM

The forced assembly of two immiscible polymers, produced by layer-multiplying co-extrusion, was analyzed by means of ultra-small-angle X-ray scattering (USAXS). The materials were produced in the laboratory of Prof. E. Baer and Prof. A. Hiltner from Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio, USA). Comparison of scattering and atomic force microscopy (AFM) results sheds light on many details of the nanolayered structure in PET/PC films. The use of USAXS, with the X-ray beam slightly rotated from a parallel configuration with respect to the PET/PC nanolayered film surfaces, revealed the occurrence of scattering maxima corresponding to the stacking periodicities. Annealing of the nanolayered films mainly provokes the crystallization of PET; consequently the scattering maxima are more clearly developed due to the increase in the electron density difference between the alternating polymer layers. The experimental long spacings, derived from USAXS, show values which correlate fairly well with the nominal periodicity values of the stacks prepared by the co-extrusion method. AFM images derived from localized areas reveal periodicities which are also in good agreement with the USAXS data averaged over much larger regions. The appearance of at least two scattering peaks in all investigated cases, accounts for the high regularity of the nanostructure that can be obtained by means of the co-extrusion processing technique.

STRUCTURE MODIFICATION IN CROSSLINKED ISOTACTIC POLYPROPYLENE-CLAY COMPOSITES

This work is an extension of our previous study based on the modification of new reversibly crosslinked blends of isotactic polypropylene and low density polyethylene. In collaboration with Dr. S. Bouhelal, from the University of Sétif (Algeria), we investigated composites of reversibly crosslinked isotactic polypropylene and clay. These composites were prepared by two different methods, and the proportion of incorporated clay reached up to 50 %. Characterization of the samples was carried out by wide-angle X-ray scattering (WAXS), differential scanning calorimetry (DSC) and microhardness measurements. Results obtained suggest that, for some compositions, the clay might be totally exfoliated. When the clay content is higher than 20% the mobility of the polymeric chains is restricted, thus giving rise to lower crystallinity levels. It was shown that the microhardness value is related to the clay content, also depending on the selected preparation method. There is a linear correlation between the microhardness and the crystallinity level in all the studied samples.

MORPHOLOGY DEVELOPMENT DURING FLOW-INDUCED CRYSTALLIZATION OF POLYMERS

It is well known that flows applied during polymer processing can significantly alter the kinetics of crystallization and structure development in semicrystalline polymers. Following our collaboration with the group of Prof. J.A. Kornfield, from the California Institute of Technology (CALTECH), an experimental configuration that combines the powerful capabilities of a short-term shearing apparatus with simultaneous optical and X-ray scattering techniques was demonstrated. This setup is capable of connecting the earliest events that occur during shear-induced crystallization of a polymer melt with the subsequent kinetics and morphology development. The sensitivity of rheo-optics enables the detection of dilute shear-induced oriented precursors as they form during flow, before X-ray techniques are able to reveal them. Then, as crystallization occurs from these precursors, X-ray scattering allows detailed quantification of the characteristics and kinetics of growth of the crystallites nucleated by the flow-induced precursors. This simultaneous combination of techniques permits unambiguous correlation between the early events that occur during shear and the evolution of crystallization after flow has stopped, eliminating uncertainties that result from the extreme sensitivity of flow-induced crystallization to small changes in the imposed stress and the material. Experimental data on a bimodal blend of isotactic polypropylenes were analyzed.

RE-CRYSTALLIZATION PROCESSES IN POLYETHYLENE TEREPHTHALATE (PET) UPON HEATING

The multiple melting behaviour of semicrystalline PET has been the subject of great controversy in the last decades. We followed the nanostructural changes associated to this multiple melting behaviour by means of simultaneous WAXS and small-angle X-ray scattering (SAXS), using a synchrotron radiation source. Variations in the degree of crystallinity, coherent lateral crystal size and long period values, as a function of temperature, were reported for cold-crystallized PET samples. The Interface Distribution Function (IDF) analysis was also employed to provide the crystalline and amorphous layer thickness values at various temperatures of interest. Results suggest that cold crystallized PET is subjected to a nearly continuous nanostructural reorganization process upon heating, starting immediately above the glass transition temperature T_g ($\approx 80^\circ\text{C}$) and giving rise to complete melting at approximately 260°C . For all the crystallization temperatures T_c investigated, a melting–recrystallization mechanism seems to take place once T_c is exceeded, concurrently to the low-temperature endotherm observed in the DSC scans. In addition, an extensive structural reorganization takes place above 200°C , involving the appearance of new lamellar stacks simultaneously to the final melting process. The two mechanisms should contribute to the high-temperature endotherm in the DSC scan.

A MODEL TO UNDERSTAND THE LATE STAGES OF CRYSTALLIZATION IN SEMI-RIGID POLYMERS

Existing approaches in the field of polymer crystallization discuss the growth of individual crystallites in a relaxed melt. The influence of progressive confinement of the amorphous regions as crystallinity develops is a fundamental aspect, little understood so far, for a comprehensive understanding of polymer crystallization. SAXS and WAXS techniques and dynamical mechanical thermal analysis were employed to explore the late stages of crystallization in PET. Results suggest that a rigid amorphous fraction of material (RAF) develops during the late stages of crystallization. The RAF appears at the interface between the crystals and the amorphous regions and is characterized by a partial orientation of the molecular chains. Statistical mechanical concepts were used to offer a description of the role played by the RAF, mainly consisting in a stabilizing effect on the crystalline lamellae, especially during the structural reorganization processes taking place upon heating immediately above the crystallization temperature. This idea was discussed by resorting to a phase diagram. An estimation of the chemical-potential increase of the interlamellar amorphous regions, due to the enhancement of the structural constraints hindering segmental mobility, was offered. Finally, previous calculations developed within the framework of the Gaussian chain model (F.J. Baltá Calleja *et al.*, Phys. Rev. B 75, 224201 (2007)) were used to estimate the degree of chain orientation associated to the re-crystallization processes taking place above the crystallization temperature.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH GRANTS

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

Efectos de la Correlación Electrónica en Nanotubos de Carbono.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2005-05478-C02-02.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: José González Carmona.

Periodo / Duration: December 2005-December 2008.

Objetivos / Objectives: Study of electronic instabilities and superconductivity in small-diameter carbon nanotubes and multi-walled nanotubes.

Gravedad no perturbativa y agujeros negros: simetrías, métodos numéricos y analogías en materia condensada.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2005-05736-C03-02.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Guillermo Antonio Mena Marugán.

Periodo / Duration: December 2005-December 2008.

Objetivos / Objectives: Development of nonperturbative quantization techniques for gravitational systems and application of geometric formalisms to numerical relativity.

Problemas cuánticos y numéricos en Física Gravitacional y Nuclear.

Código o Referencia / Code or Reference: 2005MX0022.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC.

Investigador Principal / Main Researcher: Jesús Fernando Barbero González.

Periodo / Duration: January 2007-December 2008.

Objetivos / Objectives: Study of problems related to numerical relativity, quantization of symmetry reductions and nuclear physics.

Programa CONSOLIDER: Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear.

Código o Referencia / Code or Reference: CSD2007-00042.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Antonio Pich Zardoya with participation of the Gravitation & Cosmology Group of the IEM.

Periodo / Duration: October 2007-November 2012.

Objetivos / Objectives: Development in Spain of particle, astroparticle, nuclear, and theoretical physics, and creation of a national center leading the research in these fields.

3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS: Primer año.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2004-21384-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2005-2008.

Objetivos / Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the ampliation of ISIS installation.

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS: Segundo año.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2005-24500-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2006-2008.

Objetivos / Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the ampliation of ISIS installation.

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS: Tercer año.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2006-26572-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2007-2009.

Objetivos / Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the ampliation of ISIS installation.

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS: Cuarto año.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2007-29322-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2008.

Objetivos / Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the ampliation of ISIS installation.

Contribución española al Millenium Program de Institut Laue-Langevin

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2007-30969-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2008.

Objetivos / Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the ampliation of ILL installation.

Métodos analíticos y numéricos para el estudio de núcleos alejados de la línea de estabilidad.

Código o Referencia / Code or Reference: IN2P3 08-08.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Jorge Dukelsky.

Periodo/ Duration: June 2008 – May 2009.

Objetivos / Objectives: Development of integrable models based on the Gaudin algebra to nuclear structure and application of density matrix renormalization group to weakly bound atomic nuclei.

Modelos exactamente solubles y cálculos de gran escala en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2006-12783-C03-01.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Jorge Dukelsky.

Periodo / Duration: January 2007- December 2009.

Objetivos / Objectives: Development of numerical and exact analytical methods for many-body quantum systems. Study of the competition between chaos and integrability in critical regions. Development of new density matrix renormalization group algorithms for the study of strongly correlated systems.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Código o Referencia / Code or Reference: IN2P3 07-04.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CICYT-MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a José García Borge (IEM, CSIC, Spain).
Bertram Blank (CENBG, CNRS, France).

Periodo / Duration: May 2007-May 2008.

Objetivos / Objectives: Study of beta-delayed proton emission in the neutron deficient Ar isotopes. And final revision of the review article “Nuclear structure at the proton drip line: Advances with nuclear decay studies”.

Contribución al Experimento ISOLDE del CERN.

Código o Referencia / Code or Reference: CAC 2007-11.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a José García Borge.

Periodo / Duration: December 2007- December 2009.

Objetivos / Objectives: To pay the Spanish year fee to ISOLDE and to sponsor the trips of the Spanish representative to the Committee meetings.

Centro Nacional de F. de Partículas, Astropartículas y Nuclear, CPAN.

Código o Referencia / Code or Reference: CDS2007-00042.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Antonio Pich.

IP IEM: M^a José García Borge.

Periodo / Duration: December 2007- December 2012.

Objetivos / Objectives: To create an institute for particles, astro-particles, and nuclear physics research.

Simulaciones para el desarrollo de un espectrómetro gamma para el experimento R3B de FAIR.

Código o Referencia / Code or Reference: A/012424/07.

Entidad Financiadora / Funding Institution: AECI-MAEC.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a José García Borge.

Tarek El Bardouni (Fac. of Sciences, Tetouan, Morocco).

Periodo / Duration: January 2008- January 2009.

Objetivos / Objectives: To perform Monte Carlo multi-particle simulations of the behaviour of the scintillators proposed for R3B at FAIR.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Código o Referencia / Code or Reference: IN2P3 08-07.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CICYT-MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a José García Borge (IEM, CSIC, Spain).

Bertram Blank (CENBG, CNRS, France).

Periodo / Duration: June 2008- May 2009.

Objetivos / Objectives: Study of beta-delayed proton emission in the neutron deficient Ar isotopes.

Estructura y Reacciones con Núcleos Exóticos.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2005-00640.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Pedro Sarriguren.

Periodo / Duration: December 2005 – December 2008.

Objetivos / Objectives: Beta-decay of exotic nuclei. Electron scattering from Nuclei. Halo Nuclei.

Estudio de la estructura nuclear y reacciones nucleares mediante métodos teóricos avanzados.

Código o Referencia / Code or Reference: 2007BG0011.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: P. Sarriguren.

Periodo / Duration: January 2008 – December 2009.

Objetivos / Objectives: Nuclear structure and reactions of exotic nuclei.

EUROpean Nuclear Structure Integrated Infrastructure initiative (EURONS).

Código o Referencia / Code or Reference: EU Contract n° 506065.

Entidad Financiadora / Funding Institution: EU-VI Programa Marco, RI3 (Integrated Infrastructures).

Investigador Principal / Main Researcher: Olof Tengblad.

Periodo / Duration: January 2005-December 2008.

Objetivos / Objectives: Design of a digitizing system for the detection of low energy charged particle, together with a cost effective multiplexed readout system.

Dinámica y estructura de núcleos exóticos ligeros. Prototipo de doble cristal para el calorímetro CALIFA del experimento R3B en FAIR.

Código o Referencia / Code or Reference: CICYT FPA2007-62170.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Olof Tengblad.

Periodo / Duration: October 2007-November 2009.

Objetivos / Objectives: Development of detectors and electronics in order to perform nuclear structure studies.

Correlaciones espacio-temporales a nanoescalas: efectos de heterogeneidad, desorden y confinamiento.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2007-65711-C04-01.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Periodo / Duration: 2007-2010.

Objetivos / Objectives: Study of the effects, due to the decrease in spacial dimensions, in nano-structured and nano-confined systems physical properties.

Dinámica de Sistemas Desordenados en Condiciones de Confinamiento.

Código o Referencia / Code or Reference: PIE-200750i007.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC.

Investigador Principal / Main Researcher: Ricardo Fernández Perea.

Periodo / Duration: 2007-2008.

Objetivos / Objectives: Study of the effects, due to the decrease in spacial dimensions, nano-confined systems dynamic properties.

Dinámica, integrabilidad y caos en sistemas cuánticos fuertemente correlacionados.

Código o Referencia / Code or Reference: CCG07-CSIC/ESP-1962.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CAM-CSIC.

Investigador Principal / Main Researcher: Rafael Molina.

Periodo / Duration: January 2008- December 2008.

Objetivos / Objectives: Characterization of the phase diagram of ultracold fermions trapped into unidimensional optical lattices. Study of the spectral statistics and decoherence in system with intermediate phase diagram, between chaos and regularity.

Materiales y Actuadores Aplicados a Estructuras y Procesos Inteligentes.

Código o Referencia / Code or Reference: ACTIMAT.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Gobierno Vasco.

Investigador Principal / Main Researcher: J.M. Barandiarán. Collaborator IEM: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2006-2008.

Objetivos / Objectives: Development of dispositives based in shape memory materials.

El fenómeno de Scaling en dispersión leptón-núcleo. Distribución de momentos en núcleos y estudios de reacciones con núcleos exóticos.

Código o Referencia / Code or Reference: PCI2006-A7-0548.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: J.A. Caballero (participation of IEM).

Periodo / Duration: January 2008 – December 2009.

Objetivos / Objectives: Scaling in lepton-nucleus scattering. Momentum distributions and reactions in exotic Nuclei.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES**Desarrollo de inyectores de potencia para aceleradores de protones de última generación.**

Código o Referencia / Code or Reference: FETS.

Empresa / Company: CDTI, Programa Nacional del Espacio.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Periodo / Duration: 2007-2011.

Objetivos / Objectives: Design and construction of a test bank for the development of the next generation of high power proton accelerator.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Determinación de tasas de transferencia de energía rotacional y parámetros espectroscópicos de moléculas de interés en procesos atmosféricos, astrofísicos o de combustión.**

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2005-02029.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MCYT.

Investigador Principal / Main Researcher: Dionisio Bermejo Plaza.

Periodo / Duration: December 2005-December 2009.

Objetivos / Objectives: Measurement of state-to-state rotational energy transfer coefficients by time-resolved double resonance Raman Spectroscopy.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).

Código o Referencia / Code or Reference: S-0505/TIC-0191, Subproject at IEM.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal / Main Researcher: Subproject at IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP: Fernando Cussó, UAM)

Periodo / Duration: January 2006-December 2008.

Objetivos / Objectives: Development of SERS and SEIRA molecular nanosensors.

Procesos de interés en la estratosfera e ionosfera terrestres. Medidas espectrométricas y ópticas en el laboratorio, y simulación teórica por métodos ab initio.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2004-00456.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Rafael Escribano.

Periodo / Duration: April 2005- May 2008.

Objetivos / Objectives: Study of icy systems of atmospheric relevance by IR spectroscopy and mass spectrometry, including stratospheric particles and ionospheric species. Analysis and theoretical prediction using complex quantum methods and models.

Crecimiento cristalino y química de películas de hielo en condiciones extremas.

Código o Referencia / Code or Reference: Ref. 200550F0051.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC (Proyecto Intramural de Frontera PIF).

Investigador Principal / Main Researcher: (Claro Ignacio Sáinz Díaz, Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra)
For the IEM team: Rafael Escribano.

Periodo / Duration: November 2005-October 2008.

Objetivos / Objectives: Study of crystalline, morphologic and spectroscopic properties of atmospherically relevant ices. Experimental and theoretical research.

Física molecular de hielos y plasmas atmosféricos y astrofísicos. Estudios de laboratorio y simulaciones teóricas.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2007-61686.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Rafael Escribano.

Periodo / Duration: October 2007- September 2010.

Objetivos / Objectives: Laboratory investigation of analogues of systems of astrophysical and atmospheric interest, in particular comet nuclei, cold plasmas in the ionospheres of Titan and Earth, and cloud aerosol particles.

Aplicación de plasmas fríos a dispositivos de fusión: formación de recubrimientos e inhibición y limpieza de películas hidrogenadas.

Código o Referencia / Code or Reference: ENE2006-14577-CO4-03/FTN.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Víctor J. Herrero.

Periodo / Duration: September 2006- September 2009.

Objetivos / Objectives: 1) Diagnostics and modelling of plasmas for the deposition of hydrogenated carbon films. Identification of basic species and processes. Id for plasmas with nitrogen species for film removal. 2) Implementation of techniques for the removal of carbonated films containing mixtures of metals of relevance for ITER.

Producción, detección, estructura y cinética de clusters de hidrógeno molecular.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2004-02576.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Salvador Montero Martín.

Periodo / Duration: December 2004-May 2008.

Objetivos / Objectives: Experimental study of the production and detection of small hydrogen clusters, up to a hundred molecules, their structure and clustering kinetics.

Study of tritium removal from macrobrush structures by oxidative methods.

Código o Referencia / Code or Reference: TW6-TTP-GAPOX.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Asociación EURATOM-CIEMAT, Marco del Programa Tecnológico de EFDA-2006 (European Fusion Development Agreement).

Investigador Principal / Main Researcher: Isabel Tanarro.

Periodo / Duration: January 2007 – December 2009.

Objetivos / Objectives: 1) Thermo-oxidation of hard a-C: H films deposited in 1mm gaps by oxygen and NO₂ and temperatures from 250 to 400°C. 2) Plasma removal of hard a-C: H films by He/O₂ and N₂/H₂ GD plasmas from gaps of 0.25, 0.4 and 1 mm width.

Colisiones moleculares de interés astrofísico y atmosférico.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2007-61430.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Periodo / Duration: October 2007-October 2010.

Objetivos / Objectives: Study of the inelastic collisions of CO, H₂, H₂O with H₂ and He at the molecular scale, to determine the state-to-state transfer coefficients at low temperature.

Control cuántico molecular: aplicaciones de interés tecnológico.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2004-2558.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Juan Ortigoso.

Periodo / Duration: April 2005-April 2008.

Objetivos / Objectives: Study of quantum control of overall rotation and internal rotation in molecules, and applications for the development of molecular motors and control of molecular conformers.

Control cuántico de moléculas adsorbidas en superficies.

Código o Referencia / Code or Reference: Acción Integrada con Hungría. HH2006-0023.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Juan Ortigoso.

Periodo / Duration: June 2007-December 2008.

Objetivos / Objectives: Application and further development of existing control methods for molecules in gas phase to interactions with surfaces.

ASTROCAM. Red de astrofísica de la Comunidad de Madrid.

Código o Referencia / Code or Reference: S-0505-ESP-000237.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal / Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla / Participant researchers of the FM department Salvador Montero Martín, José M. Fernández Sánchez, Guzmán Tejada Gala.

Periodo / Duration: January 2006-December 2009.

Objetivos / Objectives: Coordination of the activity of the Astrophysics groups in the Madrid Region.

3.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Participación Española en el Telescopio Espacial James Webb y proyectos científicos asociados.

Código o Referencia / Code or Reference: PNE2007-65475-C02-01.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Plan Nacional de Espacio.

Investigador Principal / Main Researcher: Santiago Arribas Mocoroa.

Periodo / Duration: 2007 - 2010.

Objetivos / Objectives: Studies associated to the Spanish participation on the JWST instruments and related scientific projects.

Phase a Study of a Single-Field, Wide-Band Spectrograph for the European Extremely Large Telescope.

Código o Referencia / Code or Reference: Agr. No. 18406/ESO/0717767/LCO.

Entidad Financiadora / Funding Institution: European Southern Observatory.

Investigador Principal / Main Researcher: (Niranjan Thatte, Oxford University).

CSIC: Santiago Arribas Mocoroa.

Periodo / Duration: 2008 - 2009.

Objetivos / Objectives: Phase A studies of HARMONI, an optical-infrared integral field ifirst light instrument for the Extremely Large European Telescope (42 meters, ESO).

Participación del CSIC-IEM DAMIR en el Estudio de Fase A del Instrumento HARMONI del E-ELT (European Extremely Large Telescope) de ESO.

Código o Referencia / Code or Referencia: PNAYA2008-00992-E.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Investigador Principal / Main Researcher: CSIC: Santiago Arribas Mocoroa.

Periodo / Duration: 2008 - 2010.

Objetivos / Objectives: Studies of phase A of the HARMONI instrument, focussed on: i) definition and design of the calibration subsystem, ii) comparison and sinergies with JWST, and iii) development of the science case.

ELIXIR: Early Universe Exploration with NIRSpec

Código o Referencia / Code or Reference: PITN-GA-2008-214227.

Entidad Financiadora / Funding Institution: European Commision.

Investigador Principal / Main Researcher: (Stéphane Charlot, Institut d'Astrophysique de Paris).

CSIC: Santiago Arribas Mocoroa.

Periodo / Duration: 2008 - 2012.

Objetivos / Objectives: Development of European expertise in searches for primeval galaxies to ensure maximum return of the instrument NIRSpec on board of the James Webb Space Telescope.

Molecular Universe.

Código o Referencia / Code or Reference: MRTN-CT-2004-512302.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad Europea.

Investigador Principal / Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla.

Periodo / Duration: 2005-2008.

Objetivos / Objectives: Science preparation of Herschel mission. European Project for molecular data determination in collaboration with European laboratories.

Desarrollo y explotación de instrumentación astronómica.

Código o Referencia / Code or Reference: S-0505/ESP-361.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

Investigador Principal / Main Researcher: (Jesús Gallego, Universidad Complutense).

CSIC: Luis Colina Robledo.

Periodo / Duration: December 2005 - December 2009.

Objetivos / Objectives: Development of astronomical instrumentation with industrial partners and associated science.

Galaxias luminosas infrarrojas y galaxias activas.

Código o Referencia / Code or Reference: 2008850I003.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Investigador Principal / Main Researcher: Almudena Alonso Herrero.

Periodo / Duration: October 2008-December 2009.

Objetivos / Objectives: Multifrequency studies of local Luminous and Ultraluminous Infrared galaxies, and AGN.

Estudio ab initio espectroscópico de especies moleculares de interés astrofísico. Preparación científica de Herschel y ALMA.

Código o Referencia / Code or Reference: AYA2008-00446.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Periodo / Duration: 2008-2010.

Objetivos / Objectives: Determination of structural and spectroscopic properties of molecular species of astrophysical relevance: carbonchains and prebiotic molecules.

Estudio ab initio espectroscópico de especies moleculares de interés astrofísico. Preparación científica de Herschel y ALMA.

Código o Referencia / Code or Reference: AYA2005-00702.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Periodo / Duration: 2005-2008.

Objetivos / Objectives: Determination of structural and spectroscopic properties of molecular species of astrophysical relevance: carbonchains and prebiotic molecules.

Cálculos mecano-cuánticos de moléculas de interés astrofísico: preparación del programa científico de Herschel y ALMA.

Código o Referencia / Code or Reference: PIE 2006-501082.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Periodo / Duration: 2006-2008.

Objetivos / Objectives: Potential energy surfaces of molecules of astrophysical interés. Determination of C_n carbón chains structures.

Estudios teóricos de reacciones de interés atmosférico: el papel de los átomos metálicos en la descomposición del ozono.

Código o Referencia / Code or Reference: A/8083/07.

Entidad Financiadora / Funding Institution: AEI.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez/Jaïdane Nejmeddine (Túnez).

Periodo / Duration: 2007.

Objetivos / Objectives: Theoretical studies of atmospherical processes.

Espectroscopía de moléculas no-rígidas.

Código o Referencia / Code or Reference: 58728, CoNaCYT.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México.

Investigador Principal / Main Researcher: M. Villa (with participation of IEM).
Periodo / Duration: 2007-2008.
Objetivos / Objectives: Theoretical study of propanol.

Desarrollo de infraestructura Grid para la implementación de una organización virtual de Química Computacional.

Código o Referencia / Code or Reference: PBI-05-009.
Entidad Financiadora / Funding Institution: Consejería de Ecuación y Ciencia de la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha.
Investigador Principal / Main Researcher: Camelia Muñoz Caro (with participation of IEM).
Periodo / Duration: 2005-2007.
Objetivos / Objectives: Development of a computational Grid for a virtual organization of Computational Chemistry. The system permits the determination of potential energy hypersurfaces for Astrophysics.

3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Espectroscopía de correlación bidimensional infrarroja y Raman de biomoléculas.

Código o Referencia / Code or Reference: CTQ2006-04161/BQU.
Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia, Dirección General de Investigación.
Investigador Principal / Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.
Periodo / Duration: October 2006 – October 2009.
Objetivos / Objectives: New infrared and Raman sampling accessories for time resolved deuteration measurements and subsequent 2D spectroscopic analysis.

Reacciones inducidas por láseres de IR para la deposición de materiales nanoestructurados.

Código o Referencia / Code or Reference: 2006CZ00015.
Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC y Academia de Ciencias Checa.
Investigador Principal / Main Researcher: Luis Díaz Sol y José Pola.
Periodo / Duration: January 2007-December 2008.
Objetivo / Objectives: Laser induced deposition of silicon chalcogenides and carbon nanostructured materials.

Nanosensores Moleculares basados en plasmones superficiales localizados: SERS, SEIRA y SEF.

Código de referencia / Code or Reference: FIS2006-63065.
Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.
Periodo / Duration: October 2007-September 2010.
Investigador Principal / Main Researcher: José Vicente García Ramos.
Objetivos / Objectives: Detection of compounds of environmental interest or pigments of artistic interest at the trace level or single molecules by using metal nanoparticles properly functionalized.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).

Código o Referencia / Code or Reference: S-0505/TIC-0191, Subproject at IEM.
Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad de Madrid.
Investigador Principal / Main Researcher: Subproject at IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP: Fernando Cussó, UAM).
Periodo / Duration: January 2006-December 2008.
Objetivos / Objectives: Development of SERS and SEIRA molecular nanosensors.

Interaction of Antiviral and Anticancer Photosensitizer Hypericin with liposomes and low-density lipoproteins by a new combined Surface-enhanced Raman and fluorescence method.

Código de referencia / Code or Reference: 2007SK0002.
Entidad Financiadora / Funding Institution: Acuerdo CSIC-Academia de Ciencias Eslovaca.
Periodo / Duration: 2008-2009.
Investigador Principal/ Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.
Objetivos / Objectives: SERS+SEF characterization of the interaction between antitumoral drugs with anthraquinone with structure and biomolecule transport of blood.

Adhesión de péptidos sobre superficies metálicas nanoestructuradas caracterizada mediante espectroscopia SERS: Fabricación de compuestos supramoleculares péptido-nanopartícula metálica con altas prestaciones en bionanotecnología.

Código de referencia / Code or Reference: 2007CL0029.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Acuerdo CSIC-CONICYT (Chile).

Periodo / Duration: January 2008-December 2009.

Investigador Principal // Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Objetivos / Objectives: Adsorption of peptides with adhesive properties on metals with the aim of functionalization and study of metal-protein interaction.

Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2006-07894.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal // Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Periodo / Duration: October 2006-September 2009.

Objetivos / Objectives: To investigate theoretically nanophotonic processes mediated by the excitation of surface plasmons on metallic nanostructures.

Quality seafood for improved consumer health and well-being. SEAFOODplus.

Código o Referencia / Code or Reference: VI Framework Programme, Project FP6-506359.

Entidad financiadora / Funding Institution: European Union.

Coordinador / Coordinator: T. Borresen (Danish Institute for Fisheries Research, DIFRES, Denmark)

Investigador Principal de Parte Española // Main Researcher of the Spanish Partner: Mercedes Careche, CSIC (with participation of IEM).

Periodo / Duration: June 2004 – June 2008.

Objetivos / Objectives: Improvement of fish food quality for consumer health and well-being.

Química física de plasmas de ablación y disociación láser para la deposición de nanoestructuras.

Código o Referencia / Code or Reference: CTQ2007-60177/BQU.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Marta Castillejo Striano (with participation of IEM).

Periodo / Duration: October 2007-September 2009.

Objetivos / Objectives: Research on gaseous phase reactivity of species present in the ablation plume and on photodissociation plasmas.

3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Nanoestructura y optimización de propiedades micromecánicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares. / Nanostructure and Optimization of Micromechanical Properties of Polymer Surfaces and Multi-layers Systems.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2004-01331.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo / Duration: December 2004-December 2008.

Objetivos / Objectives: Study of the correlation between nanostructure and physical properties of polymer surfaces and multilayered materials.

Study of polymer Nanostructures under Confinement as Revealed by WAXS, SAXS and USAXS.

Código o Referencia / Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20070031.

Entidad Financiadora / Funding Institution: EU.

Investigador Principal / Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo / Duration: 2007-2009.

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

Dinámica, compatibilidad molecular y nanoestructura de poliolefinas de nueva generación.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2006-0400.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Periodo / Duration: 2006-2009.

Objetivos / Objectives: In this project a combined computer simulations and experiments approach-thermodynamics, crystallization, nanostructure and properties- is applied to a new generation of polyolefins, bimodal polyethylenes obtained from dual catalysts and polar polyolefins.

Construcción molecular mediante procesos catalizados por complejos organometálicos.

Código o Referencia / Code or Reference: S-0505/PPQ/000328.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal / Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana and Víctor Cruz Cañas (IEM);
Main Researcher: Pascual Royo García (Universidad de Alcalá).

Periodo / Duration: 2006-2009.

Objetivos / Objectives: The main objective of this project is the study of transition and post-transition metal catalytic compounds for applications in processes with scientific and technological interest.

Interrelaciones estructura-propiedades de materiales poliméricos y composites poliméricos nanoestructurados en volumen y en superficie.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2005-01768.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo / Duration: December 2005-July 2009.

Objetivos / Objectives: To advance in the understanding of the phenomenology involved in the nanostructure development in three dimensions (bulk) and in two dimensions (surface) of polymers and nanocomposites.

Carbon Nanotubes as Potential Templates for Polymer Crystallization in Bulk and in Thin Film Materials.

Código o Referencia / Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20060160.

Entidad Financiadora / Funding Institution: EU.

Investigador Principal / Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo / Duration: January 2007-December 2009.

Objetivos / Objectives: To investigate the potential use of carbon nanotubes as templates in polymer nanocomposites.

Nanoestructuras poliméricas multilaminares: aproximación a un apilamiento de láminas bidimensionales. / Multilayered Polymer Nanostructures: an Approach towards Stacked Two-dimensional Layers.

Código o Referencia / Code or Reference: FIS2007-60534.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: Fernando Ania García.

Periodo / Duration: November 2007-November 2010.

Objetivos / Objectives: Study of nanolayered systems, composed by an alternate stack of thin layers of two immiscible homopolymers, covering, both, the detailed analysis of the layered nanostructure and the changes brought about by this peculiar architecture on several physical properties, specially as layer thickness decreases below a critical value (confinement in one dimension).

Arquitectura electroquímica aplicada a la síntesis de materiales nanoestructurados con propiedades magnéticas singulares.

Código o Referencia / Code or Reference: MAT2004-05865.

Entidad Financiadora / Funding Institution: MEC.

Investigador Principal / Main Researcher: M^a José Capitán Aranda.

Periodo / Duration: December 2004-June 2008.

Objetivos / Objectives: To explore several ways of synthesis of magnetic nanostructures on surfaces especially the study of the correlation existing between its nano-order and the last properties of the material.

Molecular Dynamics, Nanostructure and Intermediate States of Order (Mesophases) in Crystallisable Polymer Systems and Nanocomposites under Confinement.

Código o Referencia / Code or Reference: SAB2006-0077.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal / Main Researcher: Araceli Flores Aguilar-Amat.

Periodo / Duration: October 2007- October 2008.

Objetivos / Objectives: On the role played by confinement on molecular dynamics, nanostructure and mesophases formation in crystallisable polymer systems and nanocomposites.

Investigación de la conductividad eléctrica en materiales compuestos poliméricos con nanofibras de carbono óptimamente dispersadas.

Código o Referencia / Code or Reference: Proyecto PETRI (PET_2007_0186_03).

Entidad Financiadora / Funding Institution: MICINN.

Investigador Principal / Main Researcher: Amelia Linares Dos Santos.

Periodo / Duration: 2008-2010.

Objetivos / Objectives: Study of the electric properties of polymeric composites materials with carbon nanofibers prepared by different methods.

Efectos de confinamiento en la estructura y propiedades de polímeros y nanocomposites poliméricos estructurados.

Código o Referencia / Code or Reference: CCG07-CSIC/MAT-2296.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal / Main Researcher: Aurora Nogales Ruíz.

Periodo / Duration: January 2008-December 2008.

Objetivos / Objectives: Understanding the relevance of confinement effects on physical phenomena in macromolecular systems.

Estudio de proteínas de membrana mediante métodos biofísicos.

Código o Referencia / Code or Reference: PIE 200750I021.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC.

Investigador Principal / Main Researcher: Aurora Nogales Ruíz.

Periodo / Duration: January 2008-December 2008.

Objetivos / Objectives: To obtain information about the conformation of membrane proteins in solution by means of small angle scattering methods.

Macromolecular motion in isotropic nanoconfinement

Código o Referencia / Code or Reference: 2007/R1.

Entidad Financiadora / Funding Institution: Royal Society.

Investigador Principal / Main Researcher: Aurora Nogales, and Joao Cabral.

Periodo / Duration: January 2008-December 2009.

Objetivos / Objectives: The project seeks to elucidate how the dynamics of macromolecules change in confinement, being this aspect crucial for the development of nanotechnology which relies heavily on “soft” matter.

Investigation of morphology and kinetics of crystallization under 2D confinement in nanostructured homopolymer thin films

Código o Referencia / Code or Reference: SC-2378.

Entidad Financiadora / Funding Institution: EU / European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Cruz García Gutiérrez.

Periodo / Duration: 2008.

Objetivos / Objectives: Study of morphology and kinetics of crystallization of homopolymer thin films by Grazing Incidence X-ray Diffraction (GID).

Processing effects on the structure of SWCNT-polymer nanocomposites: The organization of SWCNT as a clue for the nanocomposite properties.

Código o Referencia / Code or Reference: MA-472.

Entidad Financiadora / Funding Institution: EU / European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

Investigador Principal / Main Researcher: M^a Cruz García Gutiérrez.

Periodo / Duration: September 2008-July 2009.

Objetivos / Objectives: Study of the organization of SWCNT in crystallizing polymer nanocomposites by *in-situ* X-ray Microdiffraction and Micro-Raman experiments.

Visualización de la estructura tridimensional de proteínas mediante microscopía electrónica de transmisión.

Código o Referencia / Code or Reference: PIE 200850I072.

Entidad Financiadora / Funding Institution: CSIC.

Investigador Principal / Main Researcher: Juan Francisco Vega Borrego.

Periodo / Duration: October 2008- December 2009.

Objetivos / Objectives: The main objective of this project is the visualization of the 3D structure of proteins and supramolecular complexes using transmission electron microscopy as an innovative approach to the study of conformation and functionality of these compounds in their native state.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins

Empresa / Company: DOW Chemicals.

Investigador Principal / Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Juan Francisco Vega Borrego.

Periodo / Duration: 2006-2008.

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

Caracterización de polímeros bimodales a partir de sus componentes.

Empresa / Company: Repsol-YPF.

Investigador Principal / Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana and Juan Francisco Vega Borrego.

Periodo / Duration: 2007-2008.

Objetivos / Objectives: The purpose of this collaboration is to investigate the influence of the different components in a dual catalyst system in the copolymerization process ethylene and 1-hexene, and also in the molecular features, microstructure and properties of the synthesized materials.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES / NATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

(Subrayado el nombre del ponente / Contributor's name is underlined).

4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

III Encuentros de Física Nuclear 2008, Santiago de Compostela, 17-19 September 2008.

- *Desintegración beta y estructura nuclear* (Invited talk), M^a José G^a Borge.
- *Study of the Triple-Alpha Process at the CMAM Accelerator in Madrid* (Oral presentation), Martín Alcorta Moreno.
- *Phoswich Advances for R3B in FAIR* (Poster), V. Gugliemina, J.A. Briz, M. Carmona, M. Turrión, O. Tengblad, and M. J. G. Borge.
- *Técnicas de estudio de núcleos exóticos: Emisión de partículas cargadas tras la desintegración beta* (Poster), Ricardo Domínguez Reyes.
- *Estructura de los estados ligados ¹²Be* (Oral presentation) Carolina Romero Redondo.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

8ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC, Sevilla, 4-5 March 2008.

- *Aplicaciones de la espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas (SERS) a la determinación de pigmentos y tintes orgánicos de interés en el Patrimonio Cultural* (Invited talk), Z. Jurasekova, M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, and J.V. García-Ramos
(Together with EVPM)

Reunión final del Proyecto “Crecimiento cristalino y química de películas de hielo en condiciones extremas”, Granada, 28-30 September 2008.

- *Hielos de interés atmosférico* (Invited talk), Belén Maté.
- *Spectroscopy Studies of H₂O, CH₃OH and CO₂ Ices Mixtures* (Invited talk), Óscar Gálvez, Belén Maté, Víctor J. Herrero, and Rafael Escribano.

I Jornada de jóvenes investigadores en Física Atómica y Molecular, Madrid, 12 December 2008.

- *Agregación de p-H₂ en expansiones supersónicas a bajas temperaturas* (Oral presentation), Juan H. Morilla.

4.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

VIII Reunión Científica de la Sociedad Española de Astronomía, Santander, 7-11 July 2008.

- *Photometric and Kinematic Characterization of Tidal Dwarf Galaxy Candidates* (Poster), Daniel Miralles Caballero, L. Colina, and S. Arribas.
- *Spitzer/IRS Mapping of Local Luminous Infrared Galaxies* (Poster), Miguel Pereira Santaella, A. Alonso-Herrero, G. Rieke, L. Colina.

II Encuentro HPC en el CSIC, Madrid, 3 June 2008.

- *Cadenas carbonadas de interés astrofísico* (Invited talk), M.L. Senent.

4.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

CYTALIA. XIII Congreso Anual en Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Madrid, 9-11 April 2008.

- *Structural Interactions between Wheat Dietary Fibre and Surimi Matrices during the Protein Gelation Process*. (Invited talk), I. Sánchez-González, P. Carmona, and M. Careche.

8ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC, Sevilla, 4-5 March 2008.

- *Aplicaciones de la espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas (SERS) a la determinación de pigmentos y tintes orgánicos de interés en el Patrimonio Cultural* (Invited talk), Z. Jurasekova, M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, and J.V. García-Ramos. **(Together with FM)**

12^{as} Jornadas de Análisis Instrumental Barcelona, 21-23 October 2008.

- *Functionalization of Ag Nanoparticles with Viologens as Chemical Nanosensor for the Detection of Persistent Organic Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Oral presentation), L. Guerrini, M. M. Campos-Vallette, and S. Sánchez-Cortés.

Conferencia Española de Nanofotónica, Tarragona, 2-4 April 2008.

- *Surface Plasmon Photonics on Metallic Nanostructures: Raman and Fluorescence Nanoantennas and Nanooptical Devices* (Oral presentation), V. Giannini, R. Rodríguez-Oliveros, J. V. García-Ramos, J. A. Sánchez-Gil, E. R. Méndez, O. Muskens, J. Gómez Rivas.
- *Surface Integral Formulation for Light Scattering from 3D Objects: Surface Plasmon Resonances in Metallic Nanoantennas* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros and J. A. Sánchez-Gil.

4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

1ª Reunión Nacional de Microespectroscopía Infrarroja con Radiación Sincrotrón (MIRAS), Madrid, 14-15 April 2008.

- *X-Ray Micro-Diffraction Applied to Soft Condensed Matter* (Poster), M^a Cruz García Gutiérrez.

IV Congreso de Jóvenes Investigadores en Polímeros, Peñíscola, 14-19 June 2008.

- *Synchrotron Light Polymer Science and the Opportunities and Challenges* (Plenary Conference), Tiberio Ezquerro Sanz.

IV Reunión de la Sociedad de Técnicas Neutrónicas Española, San Feliu de Guixols (Girona), 7-10 September 2008.

- *Modelo de baja resolución de la integrina de plaqueta humana $\alpha IIb\beta 3$ en disolución* (Oral presentation), Aurora Nogales Ruiz.
- *Dinámica y estructura en sistemas poliméricos compuestos* (Oral presentation), Alejandro Sanz Parras.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES / INTERNATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

(Subrayado el nombre del ponente/ Contributor's name is underlined).

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

Workshop Loops & Foams, Zakopane (Poland), 3-9 March 2008.

- o *Hybrid Loop Quantum Cosmology: the Gowdy T3 Model* (Invited talk), Mercedes Martín-Benito and Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Self-Adjointness of the Hamiltonian Constraint in LQC* (Invited talk), Tomasz Pawłowski.

2008 APS March Meeting, New Orleans (USA), 10-14 March 2008.

- o *Charge Polarization and Phonon Renormalization at the K Point of Graphene* (Oral presentation), José González and E. Perfetto.
- o *Competition between Pseudogap Phase and d-Wave Superconductivity in the Limit of Large Number of Coupled 1D Chain* (Oral presentation), Enrico Perfetto and J. González.

40th Symposium on Mathematical Physics “Geometry & Quanta”, Torun (Poland), 25-28 June 2008.

- o *Loop Quantum Cosmology: Modified Universe Dynamics from Spacetime Discreteness* (Invited talk), Tomasz Pawłowski.

QG2 2008 Quantum Geometry and Quantum Gravity Conference, Nottingham (UK), 30 June-4 July 2008.

- o *Loops, Black Holes, and Number Theory* (Oral presentation), Jesús Fernando Barbero González.

- o *Concept of Evolution in the Bianchi I Model within LQC* (Oral presentation), Tomasz Pawłowski.
- o *Hybrid Quantum Cosmology: Combining Loop and Fock Quantizations in the Gowdy Model* (Oral presentation), L.J. Garay, Mercedes Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

XVII Oporto Meeting on Geometry, Topology and Physics, Porto (Portugal), 10-13 July 2008.

- o *Loops, Black Holes, and Number Theory* (Oral presentation), Jesús Fernando Barbero González.
- o *Loop Quantum Cosmology and Inhomogeneities: The Gowdy Model* (Oral presentation), L.J. Garay, Mercedes Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

Young Loops & Foams, Waterloo (Canada), 28 July-1 August 2008.

- o *Loop and Fock Quantization of Symmetry Reduced Models* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Loops, Black Holes, and Number Theory* (Invited talk), Jesús Fernando Barbero González.

XVII International Fall Workshop on Geometry and Physics, Castro Urdiales (Spain), 3-6 September 2008.

- o *Loop Quantum Cosmology* (Invited conference), Guillermo A. Mena Marugán.

Numerical Modelling of Astrophysical Sources of Gravitational Radiation, Valencia (Spain), 8-12 September 2008.

- o *Second-Order Perturbations on a Dynamical Spherical Spacetime* (Oral presentation), David Brizuela.

XXXI Spanish Relativity Meeting, Salamanca (Spain), 15-19 September 2008.

- o *XAct: Efficient Tensor Computer Algebra* (Oral presentation), José M. Martín García.
- o *Non-Linear Perturbations of a Spherical Collapsing Star* (Oral presentation), David Brizuela.
- o *Semiclassical states for a symmetry reduced gravitational system* (Oral presentation), J.F. Barbero G., Iñaki Garay Elizondo, and E.J.S. Villaseñor.

2nd Workshop on Quantum Gravity, Lisbon (Portugal), 22-24 September 2008.

- o *Hybrid Quantum Cosmology: Combining Loop and Fock Quantizations* (Invited conference), Guillermo A. Mena Marugán.

Nanoscience and Nanotechnology 2008, Frascati (Italy), 20-23 October 2008.

- o *Electronic Transport in Graphene* (Invited talk), José González.

Loop Quantum Cosmology Workshop, University Park (USA), 23-25 October 2008.

- o *Hybrid Quantization of the Gowdy Cosmologies* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán.
- o *The Role of the Cosmological Constant in Loop Quantum Cosmology* (Invited talk), Tomasz Pawłowski.

4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

EURISOL User Group Workshop, Florence (Italy), 14-18 January.

- o *Beta Decay Studies at EURISOL* (Invited talk), M^a José García Borge.

Workshop on Quantum Chaos 2008, Madrid (Spain), 11-15 February.

- o *Dynamical Control of Localization in Disordered Systems* (Invited talk), R.A. Molina.
- o *Decoherence Induced by an Interacting Spin Environment in the Transition from Integrability to Chaos* (Invited talk), A. Relaño.

Chaos and Collectivity in Many-Body Systems, Dresden (Germany), 3-8 March.

- o *Decoherence Induced by an Interacting Spin Environment in the Transition from Integrability to Chaos* (Oral presentation), A. Relaño.

Cross Fertilization between Shell-Model and Energy Density Functional Methods, CEA/SPhN, Saclay (France), 6-10 April.

- o *Spin-Isospin Nuclear Properties from Energy Density Functional Calculations* (Invited talk), P. Sarriguren.

International Conference on the State of the Art in Nuclear Cluster Physics, Strasbourg (France), 13-16 May.

- o *Exactly Solvable Proton-Neutron Pairing Hamiltonians and Quartet Correlations* (Invited talk), J. Dukelsky.

Physics of Massive Neutrinos (ILIAS Milos Symposium 19), Milos (Greece), 16-28 May.

- o *Double and Single Beta Decay with Nuclear Deformation* (Invited talk), E. Moya de Guerra, R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno, and P. Sarriguren.

New Frontiers of Quantum Chaos in Mesoscopic Systems, Dresden (Germany), 18-30 May.

- o *Dynamical Control of Localization in Disordered Systems* (Oral presentation), R.A. Molina.

European Gammapool Workshop, Paris (France), 27-30 May.

- o *The ^{130}Cd Seniority Isomer* (Invited talk), Andrea Jungclaus.

XXVII International Workshop on Nuclear Theory, Rila (Bulgaria), 23-26 June.

- o *Nuclear and Nucleon Contributions to the Parity Violating Electron Scattering* (Invited talk), O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udías, T.W. Donnelly, and I. Sick.
- o *Superscaling and Charge-Changing Neutrino Scattering from Nuclei in the Δ -region beyond the Relativistic Fermi Gas Model* (Invited talk), M.V. Ivanov, M.B. Barbaro, J.A. Caballero, A.N. Antonov, E. Moya de Guerra, and M.K. Gaidarov.
- o *Neutron Skins in Exotic Nuclei from Skyrme Hartree-Fock Calculations* (Invited talk), P. Sarriguren, M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, and A.N. Antonov.

24th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, Novi Sad (Serbia), 25-29 August.

- o *Energy Deposition Model based on Electron Scattering Cross Section Data from Water Molecules* (Oral presentation), M^a José García Borge.

Zakopane Conference on Nuclear Physics, Zakopane (Poland), 1-7 September.

- o *The Shell Model Structure of Nuclei in the Vicinity of ^{132}Sn Seniority* (Invited talk), Andrea Jungclaus.

6th Workshop on Disordered Systems, Córdoba (Argentina), 8-12 September.

- o *Dynamical Control of Localization in Disordered Systems* (Invited talk), R.A. Molina.

Internacional Workshop on Scaling the Heights of the N=Z line above ^{56}Ni , ECT*, Trento (Italy), 15-19 September.

- o *Theoretical Aspects of the Beta Decay in N=Z Nuclei* (Invited talk), P. Sarriguren.

EURONS Townmeeting, Rhodas (Greece), 16-20 September.

- o *Detection of Low Energy Particle EURONS-JRA4 DLEP* (Oral presentation), Olof Tengblad.

6th Balkan School of Nuclear Physics, Troyan (Bulgaria), 17-24 September.

- o *Exactly Solvable Models of Many-Body Quantum Systems* (Invited talk), J. Dukelsky.

Workshop on Pairing Correlations in Strongly Interacting Systems: from Nuclei to Neutron Stars, Bucharest (Romania), 30-31 September.

- o *Pairing Correlations, Coper Pairs and Exactly Solvable Pairing Models* (Invited talk), J. Dukelsky.

5th Workshop on the “Critical Stability on Few-Body Quantum Systems”, Erice (Italy), 13-17 October.

- o *Few-Body Reactions in Nuclear Astrophysics* (Invited talk), E. Garrido, R. de Diego, C. Romero Redondo, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.

Journey towards and beyond the Drip Lines, Göteborg (Sweden), 16-17 October.

- o *Peering into Nuclear Structure at CERN-ISOLDE* (Invited talk), M^a José García Borge.

Neutrinos in Particle, in Nuclear and in Astrophysics (5th Annual Meeting ENTApP, WP1), Trento (Italy), 17-20 November.

- o *Single and Double Beta Decay from Selfconsistent Mean Field and beyond* (Invited talk), E. Moya de Guerra, R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno, and P. Sarriguren.

International Conference on Interfacing Structure and Reactions at the Centre of the Atom KERNZ08, Queenstown (New Zealand), 1-5 December.

- o *First Isomer Spectroscopy of the N=82 r-Process waiting Point Nucleus ^{130}Cd and its Consequences for Stellar Nucleosynthesis* (Invited talk), Andrea Jungclaus.

50th Anniversary of the Karlsruhe Nuclide Chart, Karlsruhe (Germany), 9 December.

- o *Beta Delayed Charged Particle Emission: Peering into Nuclear Structure* (Invited talk), M^a José García Borge.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Tip Enhanced Raman and Fluorescence Meeting, Teddington (UK), 24-25 January 2008.

- o *Enhanced Fluorescence of Emodin Using Silver Surfaces* (poster), P. Sevilla, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM)

8th Infrared and Raman Users Groups Conference (IRUG8), Vienna (Austria), 26-28 March 2008.

- o *Vibrational Spectroscopy as an Analytical Tool in the Identification and Characterization of Flavonoid Molecules. In Situ Detection of Weld Dye in Textile Fiber* (Oral), Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)

European Geophysical Union (EGU 2008), Vienna (Austria), 13-18 April 2008.

- o *Spectroscopic and ab Initio Study of Halogen Oxides and their Molecular Complexes* (Poster), H. Grothe, A. Zoermer, O. Gálvez, and P.C. Gómez.

5th NANOSPAIN Workshop, Braga (Portugal), 15-18 April 2008.

- o *SERS on Functionalized Silver Nanostructures: Towards the Detection of Single Molecules in Hot Spots* (Oral presentation), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)

18th International Conference on Plasma Surface Interactions (18th PSI), Toledo (Spain), 26-30 May 2008.

- o *Removal of Carbon Films by Oxidation in Narrow Gaps: Thermo-Oxidation and Plasma Assisted Studies* (Poster), I. Tanarro, J.A. Ferreira, V.J. Herrero, F.L. Tabarés, and C. Gómez-Aleixandre.

19th International Conference on Spectral line Shapes, Valladolid (Spain), 15-20 June 2008.

- o *Linewidths of C₂H₂ Perturbed by H₂: Calculations from an ab Initio Potential and Comparison with Experimental Results* (Poster), F. Thibault, B. Corretja, A. Viel, D. Bermejo, R.Z. Martínez, and B. Bussery-Honvault.
- o *Collisional Line Widths of Autoperturbed N₂: Measurements and Quantum Calculations* (Poster), E. Thibault, L. Gómez, D. Bermejo, and R.Z. Martínez.

AICI-HiT-SPARC meeting, Cambridge (UK), 16-18 June 2008.

- o *A Spectroscopic and ab Initio Study of Halogen Oxides and their Molecular Complexes* (Poster), H. Grothe, A. Zoermer, O. Gálvez, and P.C. Gómez.

Asia Oceania Geoscience Society (AOGS), Busan (Korea), 16-20 June 2008.

- o *Trapping and Adsorption of CO₂ by Amorphous Water Ice* (Invited talk), Rafael Escribano, O. Gálvez, B. Maté, and V.J. Herrero.

XVth International Symposium "Atmospheric and Ocean Optics, Atmospheric Physics", Krasnoyarsk (Russia), 22-29 June 2008.

- o *Surface-Enhanced Raman (SERS) and Infrared (SEIRA) Spectroscopic Selection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): Improving Selectivity through the Use of Different Silver Nanoparticles Functionalization Methods* (Oral presentation), C. Domingo, L. Guerrini, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)

Ninth International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT08), Montpellier (France), 29 June-4 July 2008.

- o *Controlling the Growth of Vertically-Aligned SWNTs* (Poster), V. López, F. Márquez, C. Morant, C. Domingo, E. Elizalde, and F. Zamora.

Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions, New London (USA), 5-11 July 2008.

- o *Unraveling the Photodissociation Dynamics of CH₃I by Femtosecond Ion Imaging* (Poster), J. Durá, R. de Nalda, A. García-Vela, J.G. Izquierdo, G.A. Amaral, and L. Bañares.

19th European Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases (19th ESCAMPIG), Granada (Spain), 5-19 July 2008.

- o *Ion Processes in Ar+H₂ Hollow Cathode Discharges* (Poster), I. Méndez, Victor J. Herrero, and I. Tanarro.
- o *Ion Energy Distributions for the Identification of Active Species and Processes in Low Pressure Hollow Cathode Discharges* (Oral presentation), V.J. Herrero and Isabel Tanarro.
<http://hdl.handle.net/10261/10430>
- o *Chairperson, Session of July 17, afternoon.* Isabel Tanarro.

Colloque de la Division de Physique Atomique, Moléculaire et Optique de la Société Française de Physique, Lille (France), 7-10 July 2008.

- o *Mesure des taux de relaxation d'état à état rotationnel du C₂H₂ par spectroscopie Raman stimulé* (Poster), D. Bermejo, J.L. Doménech, and R.Z. Martínez.

9th International Society for Seed Science Conference on Seed Biology, Olsztyn (Poland), 6-11 July 2008.

- o *Effect of the Atmosphere and Water Content on Seed Viability of Four Species of Brassicaceae after 36 Years Storage* (Poster), M.E. González-Benito, F. Pérez-García, G. Tejeda, and C. Gómez-Campo.

26th International Symposium on Rarified Gas Dynamics, Kyoto (Japan), 21-25 July 2008.

- o *Raman Spectroscopy Experiments on Boltzmann Collision Integral in Supersonic Jets*. Lloyd Thomas Lecture (Opening lecture), S. Montero.
- o *Inelastic Collisions of N₂, H₂, and H₂+He Mixtures in Supersonic Jets by Raman Spectroscopy* (Oral presentation), J.M. Fernández, J.P. Fonfría, A. Ramos, G. Tejeda, S. Montero, and F. Thibault.

XXI International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2008), London (UK), 17-22 August 2008.

- o *Surface-Enhanced Raman Sensors of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Based on Dithiocarbamate Calix [4]arene* (Poster), S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM)
- o *Building Plasmonic Hot Spots in Ag Nanoparticles by Using Bifunctional Viologens* (Poster), L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)
- o *Application of SERS Technique in Cultural Heritage: From Characterization to in Situ Detection of Natural Yellow Dyes Flavonoids* (Poster), Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)

XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2008), Opatija (Croatia), 31 August-5 September 2008.

- o *Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles using Bifunctional Diamines with Variable Length: Application to the Detection of Pollutants by Surface-enhanced Raman Scattering*. (Poster), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, I. Izquierdo, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM)
- o *Fabrication and Functionalization of Core-Shell Au/Ag Nanoparticles with Advanced Physico-Chemical Properties: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), C. Domingo, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM)
- o *Towards a Surface-Enhanced Raman Spectra Database of Dyed Textiles* (Poster), E. del Puerto, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and A. Roquero.
(Together with EVPM)

20th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Prague (Czech Republic), 2-6 September 2008.

- o *Measure of Rotational State-to-State Rotational Relaxation Constants in Acetylene by Stimulated Raman Spectroscopy* (Poster), J.L. Doménech, D. Bermejo, and R.Z. Martínez.
- o *A New Approach to Studying Inelastic Molecular Collisions by Raman Spectroscopy* (Oral presentation), J. M. Fernández, J.P. Fonfría, A. Ramos, G. Tejeda, S. Montero, and F. Thibault.
- o *Raman Cryospectroscopy in Supersonic Jet: the ν_1 Band of Ethane* (Poster), J.M. Fernández, G. Tejeda, and S. Montero.
- o *Stimulated Raman Spectroscopy in the Near-Nozzle Flow Field of Nitrogen Supersonic Pulsed Wxpanions* (Poster), A. Ramos, J. Santos, L. Abad, V.J. Herrero, I. Tanarro, and D. Bermejo.
- o *Clustering of para-H₂ by Raman Spectroscopy* (Poster), J.H. Morilla, J. M. Fernández, G. Tejeda, and S. Montero.

9th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2008), Capuchos (Portugal), 7-9 September 2008.

- o *Unravelling the Real-Time Photodissociation Dynamics of CH₃I by Femtosecond Ion Imaging* (Oral presentation), J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, A. García-Vela, G. A. Amaral, and L. Bañares.

XXI Reunión Nacional de Espectroscopía - V Congreso Iberico de Espectroscopía, Murcia (Spain), 9-11 September 2008.

- o *Fabrication and Functionalization of Core-Shell Au/Ag Nanoparticles with Advanced Physico-Chemical Properties: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), C. Domingo, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.

(Together with EVPM)

- o *Theoretical Absorption Spectra of High and Low Temperature Phases of Nitric Acid Dihydrate* (Poster), B. Martín-Llorente, D. Fernández-Torre, Belén Maté, V.J. Herrero, C. di Lauro, and Rafael Escribano.
- o *FTIR Spectroscopy of Atmospheric Aerosols* (Poster), Miguel Ángel Moreno, J.M. Castillo, Rafael Escribano, O. Gálvez, V.J. Herrero, Belén Maté, and Isabel Tanarro.
- o *Spectroscopic Studies of Carbon Films Removal in Narrow Gaps by Thermal Oxidation and Plasma Erosion, for Fusion Reactors like ITER* (Poster), Isabel Tanarro, J.A. Ferreira, Víctor J. Herrero, F.L. Tabarés, and C. Gómez-Aleixandre.
- o *Surface-Enhanced Raman Sensors of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Based on Dithiocarbamate Calix [4] arene* (Poster), S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.

(Together with EVPM)

- o *Mass and Energy Spectra of Ions in Cold Plasmas to Identify their Active Species and Kinetic Processes* (Poster), Isabel Tanarro and V.J. Herrero.
- o *Plasma and Surface Diagnostics of Silicon Nitride Thin Film Coatings Generated by SiH₄+NH₃ RF Discharges* (Poster), M.F. Romero, M.M. Sanz, E. Muñoz, A. Jiménez, and Isabel Tanarro.
- o *Laboratory Studies of Cometary Ice Analogs: CO₂/H₂O and CO₂/CH₃OH* (Invited talk), Belén Maté, O. Gálvez, V.J. Herrero, and R. Escribano.
- o *Surface-Enhanced Raman Scattering of Synthetic Organic Pigments* (Poster), E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.

(Together with EVPM)

- o *Building Plasmonic Hot Spots in Ag Nanoparticles by Using Bifunctional Viologens* (Poster), L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.

(Together with EVPM)

- o *Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles using Bifunctional Diamines with Variable Length: Application to the Detection of Pollutants by Surface-enhanced Raman Scattering* (Poster), L. Izquierdo, J.V. García-Ramos, L. Guerrini, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.

(Together with EVPM)

- o *Towards a Surface-Enhanced Raman Spectra Database of Dyed Textiles* (Poster), Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and A. Roquero.

(Together with EVPM)

XIV International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC XIV), Valladolid (Spain), 15-19 September 2008.

- o *Experiments on Small (H₂)_n Clusters* (Invited talk), Salvador Montero, J.H. Morilla, G. Tejada, and J. M. Fernández.

Sixth International Conference on Inorganic Materials, Dresden (Germany), 28-30 September 2008.

- o *Optical Properties of Multicomponent TeO₂-Based Thin Film Glasses* (Poster), D. Muñoz-Martín, H. Fernández, J.M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Solís, J.L.G. Fierro, C. Domingo, and J. V. García-Ramos.

(Together with EVPM)

EUROICE 2008, ESF Exploratory Workshop, Granada (Spain), 1-4 October 2008.

- o *Laboratory Study of Ices of Cometary Relevance: H₂O/CO₂, CO₂/HCH₃O* (Invited talk), Rafael Escribano.

17th International Meeting on Heritage Conservation, Castellon (Spain), 20-22 November 2008.

- o *In situ Analysis of Organic Pigments and Dyes through Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Technique* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.

(Together with EVPM)

4.2.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Observational Evidence for Black Holes in the Universe, Kolkata (India), 10-15 February 2008.

- o *Typical AGN at Intermediate Redshifts* (Oral presentation), Almudena Alonso Herrero.

MIRI European Consortium Meeting, PSI (Switzerland), February 2008.

- o *The MIRI Telescope Simulator* (Oral presentation), Álvaro Labiano

Nuclear Star Clusters across the Hubble Sequence, MPIA, Heidelberg (Germany), 25-27 February 2008.

- o *The Nucleus of NGC 4303: Identifying Star Clusters and AGN* (Invited talk), Luis Colina Robledo and A. Labiano.

Science with HARMONI/E-ELT, Oxford University (UK), 12-13 March 2008.

- o *Observing Luminous and Ultraluminous Infrared Galaxies with HARMONI* (Oral presentation) S. Arribas
- o *Closest Look at the Central Regions of Starbursts: Parsec Scale Stellar Populations and Kinematics* (Oral presentation), Luis Colina Robledo.

MIRI European Consortium meeting, Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, Oxford (UK), April 2008.

- o *MTS Functional Plan* (Oral presentation), Álvaro Labiano.

I Workshop de Physique Moléculaire: Collisions Réactive et non Réactive, Tunis (Tunisia), April 2008

- o *Ab Initio Calculations for Spectroscopy and Astrophysics* (Invited talk), María Luisa Senent.

I ARENA Workshop on Spectroscopy on Dome C: From UV to Sub-Millimetric Wavelengths, Granada (Spain), April 2008

- o *Ab Initio Calculations of Spectroscopic Parameters* (Invited talk), María Luisa Senent.

4th GPS/CSS Workshop, Riccione (Italy), May 2008.

- o *Relationship between [OIII] 5007 and 5GHz Radio Emission* (Invited talk), Álvaro Labiano.

The ELT Design Reference Mission, ESO, Garching (Germany), 20-21 May 2008.

- o *HARMONI: An AO Assisted, Narrow Field, Integral-Field Spectrograph for the E-ELT* (Invited talk), M. Tecza, N. Thatte, F. Clarke, R. Bacon, S. Arribas, E. Mediavilla, G. Rae, and R. Davies.

SPIE, Marseille (France) 23-28 June 2008.

- o *HARMONI: A Design Study for an Optical and Near-Infrared Integral Field Spectrograph for the E-ELT*, N. Thatte, M. Tecza, F. Clarke, R. L. Davies, R. M. Bacon, R. G. Rae, S. Arribas, and E. Mediavilla
- o *Science of Active Galactic Nuclei with GTC and CanariCam*, N. A. Levenson, C. Packham, A. Alonso Herrero, I. Aretxaga, L. Colina, T. Díaz Santos, M. Elitzur, R.E. Mason, E.S. Perlman, J.T. Radomsky, P.F. Roche, J.M. Rodríguez Espinosa, S. Young, and C.M. Telesco.
- o *Design and Development of MIRI, the Mid-IR Instrument for JWST*, G.S. Wright, G. Rieke, P. Barella, T., Boeker, L. Colina, E. Van Dishoek, P. Driggers, G., Goodson, T. Greene, A. Heske, T. Henning, P.-O., Lagage, M. Meixner, H. Norgaard-Nielsen, G. Olofsson, T. Ray, M. Ressler, J. Thatcher, C. Waelkens, D. Wright, and A. Zehnder.

Molecular Spectroscopy Conference, Ohio State University (USA), June 2008.

- o *CCSD(T) Study of the Far-Infrared Spectrum of Dimethyl-Ether* (Oral presentation), R. Ruiz, María Luisa Senent, R. Domínguez-Gómez, and M. Villa.
- o *Electronic Structure and Spectroscopy of the MgO₂⁺ Cation* (Oral presentation), O. Yazidi, A. ben Houria, Z. ben Lakhdar, M. Hochlaf, and María Luisa Senent.
- o *Spectroscopy and Structure of Chains Type Cn, CnH and CnSi* (Oral presentation), M.L. Senent, M. Hochlaf, H. Massó, and N. Inostroza.

Challenges in Infrared Extragalactic Astrophysics, Crete (Greece), 15-18 September 2008.

- o *Mid-Infrared Prospects for local AGN* (Invited talk), Almudena Alonso Herrero.

Second Blas Cabrera Workshop on using the GTC and Its First Light Instruments, Merida (Mexico), 2-7 November 2008.

- o *Mid-Infrared Science from Space and Ground* (Invited talk), Almudena Alonso Herrero.
- o *CanariCam Spectroscopy Data Reduction* (Lecturer), Tanio Díaz Santos.

JWST/MIRI Test Team TIM preparation. UK-ATC, Edinburgh (UK), 18-19 November 2008

- o *Out-of Band Sencitivity of MIRI-JWST* (Oral presentation), Alejandro García Bedregal, A. Labiano, L. Colina, and A. Alonso Herrero.
- o *MRS Photometric and Slope Stability Test Results* (Oral presentation), Álvaro Labiano, A. García Bedregal, L. Colina, and A. Alonso Herrero.

Science and Technological Developments with SPICA, Madrid (Spain), 25-26 November 2008.

- o *Infrared Bright Galaxies: Current Status and Spectroscopic Prospects for SPICA* (Invited talk), Almudena Alonso Herrero.

JWST/MIRI Technical Inter-exchange Meeting, Rutherford Appleton Laboratory, December 2008.

- o *MIRI Telescope Simulator. VM2 Cryogenic Test Results* (Oral presentation), Luis Colina, INTA & RAL teams.
- o *CSIC VM2 Test Results* (Oral presentation), Álvaro Labiano, A. García Bedregal, L. Colina, and A. Alonso-Herrero.

4.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

FOM-Meeting Physics@FOM Veldhoven 2008, Veldhoven (The Netherlands), 20-25 January 2008.

- o *Surface Waves on Absorbing Media* (Poster), M. Forcales, J. Gómez Rivas, and J. A. Sánchez-Gil.

Tip Enhanced Raman and Fluorescence Meeting, Teddington (UK), 24-25 January 2008.

- o *Enhanced Fluorescence of Emodin using Silver Surfaces* (poster), P. Sevilla, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
- (Together with FM)**

8th Infrared and Raman Users Groups Conference (IRUG8), Vienna (Austria), 26-28 March 2008.

- o *Vibrational Spectroscopy as an Analytical Tool in the Identification and Characterization of Flavonoid Molecules. In Situ detection of Weld Dye in Textile Fiber* (Oral presentation), Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.

5th NANOSPAIN Workshop, Braga (Portugal), 15-18 April 2008.

- o *SERS on Functionalized Silver Nanostructures: Towards the Detection of Single Molecules in Hot Spots* (Oral presentation), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
- (Together with FM)**

Advanced Materials and Nanostructures, Viña del Mar (Chile), 18-20 May, 2008.

- o *Molecular Chemosensors Based on Nanostructured Metal Surfaces: SERS (Raman), SEIRA (Infrared) and SEF (Fluorescence)* (Oral presentation), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, Z. Jurasekova, M.R. López-Ramírez, C. Domingo, P. Sevilla, J. A. Sánchez-Gil, and S. Sánchez-Cortés.
- (Together with FM)**

International Workshop FRONTIERS IN MATERIALS RESEARCH IV. Viña del Mar (Chile), 20-24 May, 2008.

- o *Functionalized Silver Nanostructures for SERS Detection of Single Molecules in Hot Spots*. (Oral), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.

XVth International Symposium "Atmospheric and Ocean Optics, Atmospheric Physics", Krasnoyarsk (Russia), 22-29 June 2008.

- o *Surface-Enhanced Raman (SERS) and Infrared (SEIRA) Spectroscopic Selection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): Improving Selectivity through the Use of Different Silver Nanoparticles Functionalization Methods* (Oral presentation), C. Domingo, L. Guerrini, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
- (Together with FM)**

Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS) 2008, Cambridge (USA), 20-25 July 2008.

- o *Surface Integral Scattering Formulation for the EM Wave Scattering from 3D Particles of Arbitrary Shape: Surface Plasmon Resonances in Metallic Nanoantennas* (Oral presentation), R. Rodríguez-Oliveros and J. A. Sánchez-Gil.

XXI International Conference on Raman Spectroscopy, ICORS 2008, London (UK), 17-22 August 2008.

- o *Surface-Enhanced Functionalization of Metal Nanoparticles and Electrodes with Viologens for Surface-Enhanced Raman Sensing of Persistent Organic Pollutants* (Poster), J.V. García-Ramos, L. Roldán, M. R. López-Ramírez, L. Guerrini, and S. Sánchez-Cortés.
- o *Surface-Enhanced Raman Sensors of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Based on Dithiocarbamate Calix[4]arene* (Poster), S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.

(Together with FM)

- o *Building plasmonic Hot Spots in Ag Nanoparticles by Using Bifunctional Viologens* (Poster), L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.

(Together with FM)

- o *Application of SERS Technique in Cultural Heritage: From Characterization to in Situ Detection of Natural Yellow Dyes Flavonoids* (Poster), Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.

(Together with FM)

- o *Metal Chelation and Radical Scavenging Ability of Catechin: Spectroscopic and Pulse Radiolysis Studies* (Poster), A. Torreggiani, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, S. Bonora, and M. Tamaba.

XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2008), Opatija (Croatia), 31 August-5 September 2008.

- o *On the Hydrogen-Deuterium Exchange in Proteins and Nucleic Acids Monitored by Vibrational Spectroscopy* (Poster), P. Carmona, M. Molina, and A. Rodríguez-Casado.
- o *Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles using Bifunctional Diamines with Variable Length: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), J.V. García-Ramos, L. Guerrini, I. Izquierdo, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.

(Together with FM)

- o *Fabrication and Functionalization of Core-Shell Au/Ag Nanoparticles with Advanced Physico-Chemical Properties: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), C. Domingo, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.

(Together with FM)

- o *Towards a Surface-Enhanced Raman Spectra Database of Dyed Textiles* (Poster), E. del Puerto, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and A. Roquero.

(Together with FM)

10th Near Field Optics (NFO-10) 2008, Buenos Aires (Argentina), 2-5 September 2008.

- o *Enhanced Fluorescence by Plasmonic Nanoantennas* (Oral presentation), V. Giannini, R. Rodríguez-Oliveros, J. V. García-Ramos, J.A. Sánchez-Gil, O. Muskens, and J. Gómez Rivas.

XXI Reunión Nacional de Espectroscopía - V Congreso Ibérico de Espectroscopía, Murcia (Spain), 9-11 September 2008.

- o *Functionalization of Metal Nanoparticles and Electrodes with Viologens for Surface-Enhanced Raman Sensing of Persistent Organic Pollutants* (Poster), J.V. García-Ramos, L. Roldán, M. R. López-Ramírez, and L. Guerrini.
- o *2D Correlation Infrared and Raman Biospectroscopy using H/D Exchange* (Poster), P. Carmona, A. Rodríguez-Casado, and M. Molina.
- o *Fabrication and Functionalization of Core-Shell Au/Ag Nanoparticles with Advanced Physico-Chemical Properties: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), C. Domingo, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, and J. V. García-Ramos.

(Together with FM)

- o *Surface-Enhanced Raman Sensors of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Based on Dithiocarbamate Calix[4]arene* (Poster), S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.

(Together with FM)

- o *Enhanced Single Molecule Fluorescence and SERS by Metallic Nanoantennas* (Oral presentation), V. Giannini, R. Rodríguez-Oliveros, J.V. García-Ramos, J.A. Sánchez-Gil, O. Muskens, and J. Gómez Rivas.

- o *Surface-Enhanced Fluorescence Study of Emodin on Silver Colloids at Basic and Acidic pH* (Poster), P. Sevilla, F. G. Blanco, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.

- o *Surface-Enhanced Raman Scattering of Synthetic Organic Pigments* (Poster), E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.

(Together with FM)

- o *Building Plasmonic Hot Spots in Ag Nanoparticles by using Bifunctional Viologens* (Poster), L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
- o **(Together with FM)**
- o *Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles using Bifunctional Diamines with Variable Length: Application to the Detection of Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering* (Poster), I. Izquierdo, J. V. García-Ramos, L. Guerrini, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
- o **(Together with FM)**
- o *Towards a Surface-Enhanced Raman Spectra Database of Dyed Textiles* (Poster), Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and A. Roquero.
- o **(Together with FM)**
- o *Descripción teórica del mecanismo de intensificación Raman y fluorescencia en nanoestructuras metálicas 3Ds* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros and J.A. Sánchez-Gil.

Congreso Argentino de Química, Tucumán (Argentina), 16-19 September 2008.

- o *Molecular Nanosensors Based on Metal Nanoparticles: SERS, SEIR and SEF* (Plenary lecture), J.V. García-Ramos, C. Domingo, P. Sevilla, M.R. Lopez-Ramirez, L. Guerrini, Z. Jurasekova, and S. Sanchez-Cortés.
- o **(Together with FM)**

Sixth International Conference on Inorganic Materials, Dresden (Germany), 28-30 September 2008.

- o *Optical Properties of Multicomponent TeO₂-Based Thin Film Glasses* (Poster), D. Muñoz-Martín, H. Fernández, J.M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Solis, J.L.G. Fierro, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
- o **(Together with FM)**

Prion 2008, Madrid, 8-10 October 2008.

- o *Amyloid β -Structure Analysis by Laser-Raman and Infrared Spectroscopy* (Poster), P. Carmona, A. Rodríguez-Casado, I. Alvarez, E. De Miguel, and A. Toledano.

17th International Meeting on Heritage Conservation, Castellón (Spain), 20-22 November 2008.

- o *In Situ Analysis of Organic Pigments and Dyes through Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) Technique* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
- o **(Together with FM)**

Deuxième Conférence sur les Techniques Analytiques Nucléaires et Conventionnelles et leur Applications (TANCA2008), Meknes (Morocco), 27-29 November 2008.

- o *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy on Plasmonic Materials Applied to the Trace Detection of Persistent Pollutants* (Plenary conference), S. Sánchez-Cortés.
- o *Preparation of Surface-Enhanced Raman Nanosensors Based on Dithiocarbamate Calyx[4]arene to Detect polycyclic Aromatic Hydrocarbons* (Poster), L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and C. Domingo.
- o **(Together with FM)**

4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

235th American Chemical Society National Meeting, New Orleans, Louisiana (USA), 6-10 April 2008.

- o *Nano-Structure Development in Glassy and Semicrystalline Polymers as Revealed by X-Ray Diffraction and Nanoindentation Methods* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja and A. Flores.

Polyfilm European Network Meeting, Leuven (Belgium), 10-11 April 2008.

- o *Nanostructure of Polyester and Ether-Crown Polymer Thin Films* (Plenary conference), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

ACS Award in Applied Polymer Science to Anne Hiltner, Cleveland (USA), 11 April 2008.

- o *Advances in the Study of the Nanostructure of Immiscible Multilayered Polymer Systems Using USAXS* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja.

Chemical Congress – 2008. ‘Chemistry for Sustainable Development’, Kathmandu (Nepal), 23-25 May 2008.

- o *Nanostructure Characterization in Multilayered Polymer Systems Using X-ray Scattering Methods and Microindentation Techniques* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja.

- o (Chairman Session), Francisco J. Baltá-Calleja.
- o *Big Molecules at the Nanometer Scale: Self-Assembling versus Multifunctionality* (Invited talk), M^a Cruz García Gutiérrez.

5th Chemical Engineering Conference for Collaborative Research in Eastern Mediterranean Countries, Cetraro (Italy), 24-29 May 2008.

- o *Multiscale Simulations of Polymers: From Atomistic Models to Entanglement Networks to Rheological Properties* (Oral presentation), S. Anogiannakis, C. Tzoumanekas, J. Ramos, and D.N. Theodorou.

Gordon Research Conference in Polymer Physics, Salve Regina College, Rhode Island (USA), 28 June-6 July 2008.

- o *Evidence of Early Stage Precursors of Polymer Crystals by Dielectric Spectroscopy* (Poster), Aurora Nogales Ruiz.
- o *Structure and Dynamics of Model Polymer Nanocomposites* (Poster), Alejandro Sanz Parras.

42nd World Polymer Congress “MACRO 2008”, Taipei (Taiwan), 29 June-4 July 2008.

- o *Entanglement Relaxation Time and Plateau Modulus of Polyethylene* (Oral presentation), Javier Martínez de Salazar Bascuñana.
- o *Computational Study of the PymNOX Catalysts for Ethylene-Methyl Acrylate Copolymerization* (Poster), Víctor Cruz Cañas.

2nd International Conference on Bioinformatics Research and Development – BIRD 2008, Technical University of Vienna (Austria), 7-9 July 2008.

- o *Molecular Dynamics Simulation of Membrane Bound State of Bacteriocin AS-48* (Poster), Víctor Cruz Cañas.

XI Simposio Latinoamericano y IX Congreso Iberoamericano de Polímeros, SLAP-2008, Lima (Peru), 15-18 July 2008.

- o *A Re-Evaluation of the Unit Cell Expansion in Polyethylene* (Poster), Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

5th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and Its Applications (BDS, IDS & DRP), Lyon (France), 26-29 August 2008.

- o *Heterogeneous Dielectrics and Heterogeneous Materials* (Invited talk), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

22nd General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, Rome (Italy), 28-30 August 2008.

- o *Langevin Dynamics of the Early Crystallization Stages of a Single-Chain Polyethylene Model Containing Main Chain Defects* (Oral presentation), Javier Martínez de Salazar Bascuñana and J. Ramos Díaz.
- o *Entanglement Relaxation Time and Plateau Modulus of Polyethylene* (Poster), Juan Francisco Vega Borrego, J. Ramos Díaz, and J. Martínez de Salazar Bascuñana.

2nd International Conference of Polyolefin Characterization, Valencia (Spain), 14-17 September 2008.

- o *Effect of Short Chain Branching in the Unit Cell of Polyethylene* (key lecture), Javier Martínez de Salazar Bascuñana.
- o *Effect of the Molecular Architecture of the Dispersed Phase in Shear and Elongational Properties of LLDPE/LDPE Blends* (Poster), Nuria Robledo Álvaro, J.F. Vega Borrego, and J. Martínez de Salazar Bascuñana.
- o *Effect of Hydrogen during Polymerization in the Molecular Structure and Properties of Bimodal PE obtained by Dual Catalyst* (Poster), Jon Otegui de la Fuente, J.F. Vega Borrego, and J. Martínez de Salazar Bascuñana.

13 International Conference Polymeric Materials 2008, Halle (Germany), 24-26 September 2008.

- o *Investigating the Nanolayered Structure of Immiscible Polymers Using Ultra Small Angle X-Ray Scattering* (Invited lecture), Francisco J. Baltá Calleja and F. Ania.
- o (Chairman session), Francisco J. Baltá-Calleja.
- o *Nanostructure Development in Oriented PET Relating to Micromechanical Properties: Hot- versus Cold-Drawing* (Oral presentation), Araceli Flores, F.J. Baltá Calleja, S. Henning, and T. Asano.
- o *Structure and Properties of Styrenic Block Copolymers and their Nanocomposites* (Oral presentation), Rameshwar Adhikari, G.H. Michler, and F.J. Baltá-Calleja.
- o *The Role of Conformational Constraints on the Segmental Relaxation Behaviour of Semi-Crystalline Polymers* (Oral presentation), Marco Pieruccini.

- o *The Role of the Amorphous Phase in the Recrystallization Process of Cold-Drawn PET* (Poster), M. Pieruccini, A. Flores, U. Nöchel, G. Di Marco, N. Stribeck, and F.J. Baltá Calleja.

3rd ICPB (Third International Conference on Polymer Behavior), Marrakech (Morocco), 3-6 November 2008.

- o *Structure and Micromechanical Properties of Nanolayered Polymer Composites: Influence of Physical Confinement* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja and F. Ania.

Reunión del Grupo de Espectroscopía Molecular del ISIS, London (UK), 4-5 November 2008.

- o *Molecular Dynamics In Semicrystalline Polymers as Revealed by Neutron Scattering: Poly(ether ether ketone)* (Invited talk), Aurora Nogales Ruiz.
- o *Dynamics of Nanocomposites based on Polystyrene and Fullerenes* (Invited talk), Alejandro Sanz Parras.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Prof. Martin Bojowald**, Penn State University, University Park, USA, 13-18 July 2008.
- ❖ **Prof. Mathew Choptuik**, University of British Columbia, Vancouver, Canada, 27 March-3 April 2008.
- ❖ **Dr. Jerónimo Cortez Quezada**, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico, 19 July-1 August 2008.
- ❖ **Dr. Alfonso García-Parrado**, University of Linköping, Linköping, Sweden, 1-31 March 2008.
- ❖ **Dra./Dr. Kristina Giesel**, NORDITA, Stockholm, Sweden, 23- 29 November 2008.
- ❖ **Dr. Enrico Peretto**, University of Rome *Tor Vergata*, Italy, 10-14 November 2008.

4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

- ❖ **Prof. A.N. Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, 28 October – 6 November 2008.
- ❖ **Prof. J. M. Arias**, University of Seville, Spain, 10-12 March and 19-21 November 2008.
- ❖ **Prof. J.A. Caballero**, Universidad de Sevilla, Spain, 20-21 February 2008.
- ❖ **Prof. S. Dimitrova**, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, 28 October – 6 November 2008.
- ❖ **Prof. M.K. Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, 7-15 July 2008.
- ❖ **Prof. José Enrique García-Ramos**, University of Huelva, Spain, 10-12 March and 19-21 November 2008.
- ❖ **Prof. A. Kievsky**, National Institute for Nuclear Physics (INFN), Padova, Italy, 3-7 March 2008.
- ❖ **Prof. G. Krumova**, Rousse University, Bulgaria, 30 October – 6 November 2008.
- ❖ **Prof. Jon Links**, University of Queensland, Australia, 21-26 February 2008.
- ❖ **Prof G. Ortiz**, University of Indiana, USA, 21 June - 4 July 2008.
- ❖ **Prof. A. A. Raduta**, Bucharest University, Romania, February-March 2008.
- ❖ **Prof. Nicu Sandulescu**, Institute for Nuclear Physics and Nuclear Engineering, Romania, 1-20 January 2008.
- ❖ **Prof. Andres Zuker**, Institute of Subatomic Investigations, Strasbourg, France, 28 January-9 February 2008.
- ❖ **Dra./Dr. R. Álvarez Rodríguez**, University of Aarhus, Denmark, March 2008.
- ❖ **Dr. P. Barletta**, University College, London, United Kingdom, 3-7 March 2008.
- ❖ **Dr. Daniel Galaviz Redondo**, University of Lisbon, Portugal, 1-3 October 2008.
- ❖ **Dr. Henryk Mach**, Uppsala University, Sweden, 13 October - 25 December 2008.
- ❖ **Dr. R. Rodríguez-Guzmán**, CEA/SPHn, Saclay, France, 17-19 April 2008.
- ❖ **Dr. R. Rodríguez-Guzmán**, University of Jyväskylä, Finland, 23-24 October 2008.
- ❖ **Dr. S. Rombouts**, University of Aarhus, Denmark, 20-24 October 2008.
- ❖ **Dr. Nara Sing**, University of York, York, United Kingdom, 20-25 November 2008.
- ❖ **D./Mr. Pedro Pérez Fernández**, University of Sevilla, Spain, 15 January-1 March, and 1 October-30 November 2008.
- ❖ **D./Mr. Hannes Hultgren**, Göteborg University, Sweden, 25-30 November 2008.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Tomohide Niimi**, Nagoya University, Nagoya, Japan, 13-14 October 2008.
- ❖ **Prof. Jaime de Urquijo**, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico, 21-31 July, 2008.
- ❖ **Dr. Attila Karpatti**, Hungarian Academy of Sciences, Hungary, 1-14 June 2008.
- ❖ **Dr. Viktor Szalay**, Hungarian Academy of Sciences, Hungary, 1-14 June, and 24 November-5 December 2008.
- ❖ **Dña./Ms. María Paz Gallego-Iniesta García**, Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, Spain, 14-25 April 2008.

4.3.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

- ❖ **Prof. Adel ben Houria**, University of Tunes el Manar, Tunisia, July 2008.
- ❖ **Prof. Majdi Hochlaf**, University Paris-Est Marne la Vallée, France, January, February, and July 2008.
- ❖ **Prof. Jorge Ricardo Letelier**, University of Chile, Chile, January 2008.
- ❖ **Prof. Roberto Maiolino**, University of Rome, Italy, 20-21 February 2008.
- ❖ **Prof. Annie Spiedelfel**, Observatory of Paris-Meudon, France, March 2008.
- ❖ **Prof. Maria Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana de México, Mexico, September 2008.
- ❖ **Dr. Driss ben Abdallah**, University of Tunes el Manar, Tunisia, February 2008.
- ❖ **Dr. Jesús Falcón Barroso**, Astrophysics Division, ESA, The Netherlands, 16-18 January 2008.
- ❖ **Dr. Adriaan Carter**, National Institute of Standards and Technology, USA, 29 June – 1 July 2008.
- ❖ **Dr. Miguel Angel Pérez Torres**, Instituto de Astrofísica de Andalucía, Spain, 27-28 March 2008.

4.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

- ❖ **Prof. Ricardo Aroca**, Chemistry y Biochemistry Departament, Windsor Univ. Canada, 1May- 31 October 2008.
- ❖ **Prof. Marcelo Campos-Vallette**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 10-29 de October 2008.
- ❖ **Prof. J. Pola**, Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., Czech Republic, 6-17 October 2008.
- ❖ **Dra./Dr. Marian Antalík**, Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 6-13 May 2008.
- ❖ **Dra./Dr. Ornella Francioso**, Agrarian Faculty, Bologna University, Italy, 19-27 May 2008.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 6-13 May 2008.
- ❖ **Dr. Demetrio Macías**, University of Technology of Troyes, France, 3-16 February 2008.
- ❖ **Dr. Victor Ruiz**, Centro de Invest.Cient. y de Estudios Superiores de Ensenada, Mexico, 3-16 February 2008.
- ❖ **D./Mr. Pablo Albella**, Universidad de Cantabria, Santander, Spain, June-July 2008.
- ❖ **Ldo. /BSc Álvaro Aliaga**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 15 April-15 May 2008.
- ❖ **D./Mr. Tomás Kreněk**, University of West Bohemian, Pilsen, Faculty of Mechanical Engineering, Czech Republic, 15 September -15 December 2008.
- ❖ **Ldo. /BSc Gejza Lajos**, Biophysics Department, University P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 1 February-10 July 2008.
- ❖ **Lda./BSc Lorena Roldán**, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, Argentina, 1 January-30 April 2008.

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Peggy Cebe**, Physics and Astronomy Department. Tufts University Arts, Sciences and Engineering, Medford, Massachussets, USA, 26-28 May 2008.
- ❖ **Prof. Gert Strobl**, Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Freiburg, Germany, 22-24 October 2008.
- ❖ **Prof. Shigeyuki Toki**, Department of Chemistry, State University of New York at Stony Brook, NY, USA, 15-18 November 2008.
- ❖ **Dr. Said Bouhelal**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Algeria, 20 October-20 November 2008.

4.4. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED CONFERENCES

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

Prof. Martin Bojowald.

Penn State University, University Park, PA, USA.

Effective Equations of Motion in Loop Quantum Cosmology.

14 July 2008.

Prof. Martin Bojowald.

Penn State University, University Park, PA, USA.

Effective Constraints in Loop Quantum Cosmology.

15 July 2008.

Prof. Mathew Choptuik.

University of British Columbia, Vancouver, Canada.

Critical Phenomena in Gravitational Collapse.

31 March 2008.

Prof. Alan Sokal.

New York University, USA.

Beyond the Matrix-Tree Theorem: Fermionic (Grassmann) Representation for "Spanning (Hyper) Forests and Other Combinatorial Objects.

31 October 2008.

Dr. Alfonso García-Parrado.

University of Linköping, Sweden.

Killing Spinor Initial Data Sets.

26 March 2008.

Dra./Dr. Kristina Geisel.

NORDITA, Stockholm, Sweden.

Introduction to Loop Quantum Gravity (6 lectures).

24-25 November 2008.

Dr. Madhavan Varadarajan.

Raman Research Institute, India.

Quantum Gravity and the Information Loss Problem.

22 January 2008.

International Loop Quantum Gravity Seminars:

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

Prof. Laurent Freidel.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

Quantum Gravity Perspective on AdS/CFT.

8 April 2008.

Prof. Jerzy Lewandowski.

IFT, Warsaw, Poland.

LQC: Unfrequently Asked Questions.

6 May 2008.

Prof. Jerzy Lewandowski.

IFT, Warsaw, Poland.

Physical Solutions and Relative Observables via the Group Averaging: New Examples from LQC.

4 November 2008.

Prof. Carlo Rovelli.

CPT, Marseille, France.

Stepping out of Homogeneity in Loop Quantum Cosmology.

22 April 2008.

Prof. Lee Smolin.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

Possibly Observable Cosmological Consequences of Quantum Gravity.

21 October 2008.

Prof. Daniel Sudarsky.

UNAM, Mexico.

Could the Seeds of Cosmic Structure be the First Evidence of a Quantum Gravity Related Phenomena?

9 September 2008.

Dra./Dr. Kristina Giesel.

Albert Einstein Institute, Postdam-Golm, Germany.

Manifestly Gauge Invariant Relativistic Perturbation Theory.

25 March 2008.

Dr. Kirill Krasnov.

University of Nottingham, UK.

Self Dual Gravity.

5 February 2008.

Dr. Parampreet Singh.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

Loop Quantum Cosmos are Never Singular.

18 November 2008.

Dr. Nicolas Yunes.

Princeton University, NJ, USA.

How constant is the Barbero-Immirzi "Constant"?

7 October 2008.

D./Mr. Victor Taveras.

Penn State University, University Park, PA, USA.

Improved Effective Equations in Loop Quantum Cosmology.

19 February 2008.

4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Prof. J. Links.

Centre for Mathematical Physics, University of Queensland, Australia.

Simulating Dynamical Maps: A Kicked Ion in a Trap.

22 April 2008.

Prof. A. Zuker.

Institute of Subatomic Investigations, Strasbourg, France.

Formation of Shells and Nuclear Masses.

1 February 2008.

Dr. R. Rodríguez-Guzmán.

CEA-Saclay, France.

Simplified Shell Model-like Hamiltonians from Skyrme-like EDF: Quadrupolar and Pairing.

18 April 2008.

Dr. S. Rombouts.

Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus. Denmark.

Asymmetric Pairing Phases in the 2D Hubbard Model.

21 October 2008.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Prof. Jaime de Urquijo.

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico.

Transporte y reactividad de iones y electrones en gases.

23 July 2008.

Dr. Pepa Cabrera-Sanfélix.

Donostia International Physics Center, San Sebastián, Spain.

Adsorption of H₂O and CO₂ at the Surface of Atmospheric Particles.

23 May 2008.

4.4.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Prof. Roberto Maiolino.

INAF- Osservatorio Astronomico di Roma, Italy.

*Metallicities in High-*z* Galaxies.*

21 February 2008.

Dr. Falcón Barroso.

Astrophysics Division, ESA, The Netherlands.

Circumnuclear Star-Forming Rings in Galaxies.

17 January 2008.

Dr. Adriaan Carter.

National Institute of Standards and Technology, USA.

The NIST Low Background Infrared Facility for Absolute Calibration of Cryogenic Black Bodies.

30 July 2008.

Dra./Dr. Marisa García Vargas.

Fractal, S.L., Spain.

Desarrollos recientes en modelos de síntesis de población estelar.

24 November 2008.

Dr. Miguel Angel Pérez Torres.

Instituto de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Spain.

Radio Supernovae in Luminous Infrared Galaxies.

28 March 2008.

D./Mr. Ruyman Azzollini.

Instituto de Astrofísica de Canarias, Tenerife, Spain.

Crecimiento de discos estelares a redshifts menores que uno.

28 November 2008.

Dña. Chiara Mancini.

Department of Astronomy. University of Florence, Italy.

Searching for Massive Galaxies at Redshifts of 3 to 5 in GOODS-N.

28 November 2008.

4.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Dr. Demetrio Macías

ICD-Laboratory of Nanotechnologies and Optical Instrumentation, University of Technology of Troyes, France.

Síntesis de nano-estructuras plasmónicas mediante métodos de optimización estocásticos.

13 February 2008.

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Prof. Peggy Cebe.

Department of Physics and Astronomy, Tufts University, Boston, U.S.A.

Characterization of Beta Sheet Crystals in B. Mori Silk.

26 May 2008.

Prof. Alejandro J. Müller.

Departamento de Ciencia de los Materiales, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela.

Aplicaciones del fraccionamiento térmico de alta velocidad a la caracterización de polímeros.

13 May 2008.

Prof. Gert Strobl.

Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Freiburg, Germany.

Recent Views on Polymer Crystallization.

22 October 2008.

Prof. Shigeyuki Toki.

Department of Chemistry, State University of New York at Stony Brook, NY, U.S.A.

Time and Temperature-Resolved Study by Synchrotron X-ray on Strain-induced Crystallization and the Role of Natural Impurities in Natural Rubber.

17 November 2008.

Dr. Gary Ellis.

Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC.

Espectroscopía y microespectroscopía IR con radiación sincrotrón: aplicaciones en diversos materiales.

29 February 2008.

Dr. Marco Pieruccini.

Istituto per I Processi Chimico-Fisici, CNR, Messina, Italy.

The Role of Conformational Constraints on the Segmental Relaxation Behaviour of Semi-Crystalline Polymers.

12 December 2008.

Dr. Jorge Rubio-Retama.

Departamento de Química-Física, Facultad de Farmacia, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spain.

Microgeles híbridos multirespuesta.

17 June 2008.

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS

(De una semana o más / One week or longer)

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

Guillermo A. Mena Marugán.

- Institute for Gravitation and the Cosmos (IGC), Penn State, University Park, PA, USA, 16 February-1 March 2008.
- Instituto de Matemáticas, Unidad de Morelia, UNAM, Morelia, Mexico, 2-15 June 2008.

Gonzalo Olmo Alba.

- Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Ontario, Canada, 14-30 November 2008.

Tomasz Henryk Pawłowski.

- Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Ontario, Canada, 4-24 May 2008 and 28 October-22 November 2008.
- Center for Theoretical Physics, PAN, Warsaw, Poland, 8-22 June 2008.

- Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Warsaw, Poland, 22-29 June 2008 and 3-16 August 2008.
- Institute for Gravitation and the Cosmos, Penn State University, State College PA, USA, 1-14 September 2008 and 21-28 October 2008.

David Brizuela Cieza.

- Center for Scientific Computation and Mathematical Modeling, University of Maryland, USA, 21 September-4 October 2008.

Iñaki Garay Elizondo.

- Dept. of Physics, National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, 8-15 July 2008.
- Dept. of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, 15 July-24 August 2008.
- Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands, 1 October-1 December 2008.

Daniel Gómez Vergel.

- Dep. de Matemática, Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal, 1-28 October 2008.

Mercedes Martín Benito.

- Institute for Gravitation and the Cosmos (IGC), Penn State, University Park, PA, USA, 23 February-1 March 2008.
- Planck Institut für Gravitationsphysik (Albert Einstein Institute), Potsdam-Golm, Germany, 22 October-21 November 2008.

4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

- TRIUMF: Canada's National Laboratory for Particle and Nuclear Physics, Vancouver, Canada, 10-30 July 2008.

Eduardo Garrido Bellido.

- National Institute for Nuclear Physics, INFN, Pisa, Italy, 18-25 October 2008.
- Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 23-30 November 2008.

Andrea Jungclauss.

- GANIL, Caen, France, 8-15 April and 17-24 June 2008.
- Michigan State University, East Lansing, USA, 8-15 October 2008.

Olof Tengblad.

- TRIUMF: Canada's National Laboratory for Particle and Nuclear Physics, Vancouver, Canada, 1-31 July and 4-17 October 2008.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Institute of Physics and Chemistry of Materials, Strasbourg, France, 14-20 July 2008.
- University of Karlsruhe, Germany, 1 April-31 August 2008.

Mariano Carmona Gallardo.

- KVI (Kernfysisch Versneller Instituut), Groningen, The Netherlands, 10-20 December 2008.

Martín Alcorta Moreno.

- JYFL, University of Jyväskylä, Jyväskylä, Finland, 10-21 January 2008.
- TRIUMF, Vancouver, Canada, 7 July-5 August 2008.
- Inst. of Physics and Astronomy, Aarhus University, Aarhus, Denmark, 21 September-12 December 2008.

José Antonio Briz.

- ISOLDE-CERN, Geneva, Switzerland, 7-18 July and 5-11 November 2008.

Mario Alberto Cubero Campos.

- ISOLDE, Geneva, Switzerland, 6-13 May 2008.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 7 July-5 August 2008.
- TRIUMF, Vancouver, Canada, 5-23 October 2008.

Raúl de Diego Martínez.

- Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 1 August-3 October 2008.

Óscar Moreno Díaz.

- Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan, 18 July-29 September 2008.

Carolina Romero Redondo.

- National Institute for Nuclear Physics, INFN, Pisa, Italy, 21 September-23 December 2008.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto.

- Institute of Atmospheric Optics, RAS, Tomsk, Russia, 17 June-5 July 2008.

Julio Santos Gómez.

- Research Institute for Solid State Physics and Optics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary, 29 August-10 September 2008.

Oscar Gálvez González.

- Institute of Material Chemistry, Vienna University of Technology, Vienna, Austria, 14-23 July 2008 (and 13-18 April).

4.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

María Luisa Senent Diez

- Universidad Autónoma Metropolitana de México, Mexico, June 2008.
- Department of Physics, LSAMA Laboratory, University of Tunes “El Manar”, Tunisia, October 2008.
- University of Paris-Es, Marne la Vallée, France, October 2008.

Almudena Alonso Herrero.

- Indian Institute of Astrophysics, Bangalore, India, 2-10 February 2008.
- Department of Astrophysics, University of Oxford, Oxford, United Kingdom, 19 July-8 August 2008.
- Department of Astrophysics, University of Cologne, Cologne, Germany, 3-9 December 2008.

Alejandro García Bedregal

- Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, Oxford, United Kingdom, 15-22 September 2008.

Álvaro Labiano Ortega

- Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, Oxford, United Kingdom, 23-29 September 2008.

4.5.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Santiago Sánchez Cortés

- Biophysics Department, University P. J. Safarik and Institute of Experimental Physics of the Slovak Sciences Academy, Kosice, Slovakia, 4-11 November 2008.
- Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 10-24 December 2008.

Luis Díaz Sol

- Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., Prague, Czech Republic, 16-23 June 2008.

Luca Guerrini

- University of California Santa Bárbara, USA, 22 April-19 June 2008.

Zuzana Jurasekova

- Institute for Organic Synthesis and photoreactivity, Consiglio Nazionale de la Recerca, CNR, Bologna, Italy, 2 April-14 May 2008.

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

- State University of New York at Stony Brook, NY, USA, 16-23 April 2008.
- University of Leipzig, Leipzig, Germany, 30 September-7 October 2008.

Tiberio Ezquerro Sanz.

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 16-25 July 2008.

Fernando Ania García.

- State University at Stony Brook and NSLS (Brookhaven), NY, U.S.A., 14-22 April 2008.

Aurora Nogales Ruiz.

- Institute Laue-Langevin, Grenoble, France, 11-17 December 2008.

Mari Cruz García-Gutiérrez.

- Institute Laue-Langevin, Grenoble, France, 11-18 December 2008.

Alejandro Sanz Parras.

- Rutherford Appleton Laboratory (ISIS), United Kingdom, 12-18 December 2008.

Jaime Javier Hernández Rueda.

- Institut für Mikrosystemtechnik, Freiburg, Germany, 1 October-28 November 2008.

CAPÍTULO 5
**LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA
Y OTRAS ACTIVIDADES**

CHAPTER 5
**TEACHING, OUTREACH, AND OTHER
ACTIVITIES**

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO Y MÁSTER / PHD AND MASTER COURSES

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

Luis J. Garay Elizondo, Guillermo A. Mena Marugán, Mercedes Martín Benito, and Francisco J. Chinae.

- Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense de Madrid.
Relatividad general avanzada y agujeros negros (6 créditos).

Gonzalo Olmo Alba.

- Programa de movilidad del Máster en Física Teórica, Nuclear y Astrofísica de la Universidad de Valencia.
Modified Gravity: Lessons and Challenges (1 crédito).

5.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

- European Master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics. Erasmus Mundi / IEM-CSIC.
Techniques in Plasmas, Nuclear Physics and Materials (6 créditos).
- Programa de Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidades y Centros del CSIC (IEM-IFIC).
Física Nuclear Experimental (4 créditos).

Eduardo Garrido Bellido.

- Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidad Complutense de Madrid.
Sistemas de pocos cuerpos en Física Nuclear: Núcleos con halo (1 crédito).

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. Universidad Complutense de Madrid.
Núcleos deformados. Excitaciones de Gamow-Teller. Aplicaciones en Astrofísica (1 crédito).

Olof Tengblad.

- European master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics. Erasmus Mundi / IEM-CSIC.
Laboratory Project (6 créditos).
- Master Instrumentación Nuclear básica. Universidad de Huelva.
Electrónica y Adquisición de datos (4 créditos).

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto.

- Física de la Luz y de la Materia (Máster en Fotónica, Programa Oficial de Postgrado con Mención de Calidad 2007-2008, MEC). Universidad Autónoma de Madrid.
Fotónica Medioambiental y Biofotónica (4 créditos).

Salvador Montero Martín

- Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química –QUIMILASER (Programa de Doctorado Interuniversitario con Mención de Calidad MEC). Universidad Pablo de Olavide, Seville.
Espectroscopía Raman en jets supersónicos (Lección magistral invitada).

José Luis Doménech Martínez.

- Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química –QUIMILASER (Programa de Doctorado Interuniversitario con Mención de Calidad MEC). Universidad Pablo de Olavide, Seville.
Técnicas Espectroscópicas e Instrumentación (3 créditos).

José M. Fernández Sánchez.

- Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química –QUIMILASER (Programa de Doctorado Interuniversitario con Mención de Calidad MEC). Universidad Pablo de Olavide, Seville.
Experimentación Avanzada en Láseres (4 créditos).

5.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Santiago Arribas Mocoroa.

- Universidad Autónoma de Madrid.
Temas Avanzados de Astrofísica y Cosmología: Introducción a la Espectroscopia de Campo Integral y sus aplicaciones (1 crédito).

5.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

José Vicente García Ramos.

- Facultad de Ciencias. Universidad de Educación a Distancia.
Espectroscopía Raman: Nuevas tendencias y aplicaciones (6 créditos)

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS / COURSES AND CONFERENCES

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

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Hybrid Quantization of the Gowdy Model*, Institute for Gravitation and the Cosmos, Penn State, University Park, USA, 26 February 2008.
- *Gravedad y Cosmología Cuánticas de Lazos*, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas, UPM, Madrid, Spain, 30 May 2008.
- *Modelos por reducción de simetría en relatividad general*, Instituto de Matemáticas, Unidad de Morelia, UNAM, Morelia, Mexico, 6 June 2008.
- *Física de Agujeros Negros*. Part of the outreach activity "El Planeta Interior y el Planeta Exterior" included in the Program "Ciencia en la Ciudad", Valdepeñas, Spain, 3 November 2008.

Tomasz Henryk Pawłowski.

- *Wprowadzenie do petlowej kosmologii (An Introduction to Loop Cosmology)*, Center for Theoretical Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland, 18 June 2008.

Iñaki Garay Elizondo.

- *Quantum Gravity effects in a symmetry reduced system*, Universidad de Valencia, Spain, 24 April 2008.
- *Quantum Gravity effects in a symmetry reduced system*, Instituto de Astrofísica de Andalucía CSIC, Granada, Spain, 28 April 2008.
- *Quantization of Einstein-Rosen waves coupled with matter*, Instituto de Matemáticas y Física Fundamental CSIC, Madrid, Spain, 8 May 2008.
- *Quantum Gravity effects in a system with cylindrical symmetry*, National Central University, Jhongli, Taiwan, 7 July 2008.
- *Quantum Gravity effects in a system with cylindrical symmetry*, National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan, 8 July 2008.
- *Quantum Gravity effects in a system with cylindrical symmetry*, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, 22 August 2008.
- *Quantum Gravity effects in a system with cylindrical symmetry*, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands, 16 October 2008.

Daniel Gómez Vergel.

- *Axiomatic Structure of Quantum Mechanics*, Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal, 13 October 2008.

5.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Mª José García Borge.

- *E1104: Dipole polarizability of halo nuclei*, TRIUMF, Vancouver, Canada, 16 July 2008.

Olof Tengblad.

- *E1104: Dipole polarizability of halo nuclei*, TRIUMF, Vancouver, Canada, 14 October 2008.
- *DLEP: Multiplexed electronics for charge particle telescopes*, Vienna, Austria, 4 April 2008.

Elvira Moya de Guerra.

- *Las mujeres trabajan en ciencia*, “Ciclo de Ciencia y Tecnología 2008”, Universidad Complutense de Madrid, Spain, March 2008.
- *Las mujeres también investigan*, “Ciclo anual FECYT: Las mujeres también investigan”, Madrid, Spain, November 2008.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza

- *Spectroscopie Raman à haute résolution*, Université de Tunis, Ecole Supérieure des Sciences et Techniques de Tunis, Tunisia, 18 January 2008.
- *High Resolution Raman spectroscopy*, Università degli Studi di Bologna, Dipartimento di Chimica Fisica e Inorganica, Bologna, Italy, 6 March 2008.

Concepción Domingo Maroto.

- *Molecular Nanosensors based on Localized Surface Plasmons: SERS, SEIRA and SEF*, Donostia International Physics Center, San Sebastián, Spain, 22 February 2008.
- *Resonant Raman Spectroscopy for Characterization of Carbon Nanotubes and Related Composites*, Institute of Atmospheric Optics, RAS, Tomsk, Russia, 2 July 2008.
- *Quimiosensores basados en SERS y SEIRA*, ETSII, Universidad de Valladolid, Spain, 12 November 2008.

Rafael Escribano

- *Laboratory Simulation of Ices in the Solar System: Cometary ice analogs*, Clare Hall Alumni Meeting, Barcelona, Spain, 4 September 2008.

Víctor J. Herrero

- *Cumulative Reaction Probabilities: An Investigation of Transition State Properties and Stereodynamics in Elementary Chemical Systems*, Fritz Haber Institut der Max Planck Gesellschaft, Berlin, Germany, 18 April 2008.

Isabel Tanarro

- *Plasmas en la naturaleza, la tecnología y la ciencia: de la aurora boreal al interior de una estrella, de la pantalla de plasma al reactor de fusión*, I.E.S. Nº 2 de Ciempozuelos, Madrid, Spain, 15 January 2008.
- *Plasmas en la naturaleza, la tecnología y la ciencia: de la aurora boreal al interior de una estrella, de la pantalla de plasma al reactor de fusión*, I.E.S. Gustavo Adolfo Becker, Algete, Madrid, Spain, 25 April 2008.

5.2.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

María Luisa Senent Diez

- *Computational chemistry*, University of Burgos, Spain, June 2008.

Álvaro Labiano.

- *El telescopio especial James Webb*, “Feria Madrid es Ciencia 2008”, IFEMA, Madrid, Spain, April 2008.

5.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Santiago Sánchez Cortés.

- *Técnicas Raman para la inspección y diagnóstico de bienes patrimoniales*, course of “Aplicaciones del láser en la conservación de bienes de interés cultural”, Fundación de la Universidad de Málaga, 14-17 July 2008.
- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy on Metal Nanoparticles*, Departamento de Biofísica, Universidad P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 5 November 2008.

José A. Sánchez Gil

- *Intensificación de la fluorescencia por nanoantenas metálicas con resonancias plasmónicas*, Instituto de Microelectrónica de Madrid, CSIC, Tres Cantos, Madrid, Spain, 25 June 2008.

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Mechanical Performance of Copolymer/Layered Silicate Nanocomposites*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle, Germany, 28 January 2008.
- *Microindentation Hardness Studies of Polymer Surfaces: Non-destructive Characterization of Biomaterials*, University of Leipzig, Leipzig, Germany, 30 September 2008.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- *Curso: Aplicación de la radiación sincrotrón a la caracterización de materiales*, Universidad de Sevilla, Sevilla, Spain, 7 October 2008.
- *Máster de Cristalografía y Cristalización Módulo I: Fundamentos matemáticos, físicos y químicos de la Cristalografía. Tema 4: Gases, líquidos, polímeros y Amorfos*, Universidad Menéndez-Pelayo/CSIC, Granada, Spain, 20- 21 October 2008.
- *Ordering Processes in Soft Condensed Matter by Means of Time Resolved Broad Band Dielectric Spectroscopy*, University of Halle, Germany, 4 September 2008.

Aurora Nogales Ruiz.

- *Seminario: Relación entre dinámica y estructura en polímeros cristalizables*, Universidad Complutense de Madrid, Departamento de Química Física I, Madrid, Spain, 25 April 2008.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Experimentos y teorías aplicados a la reología de poliolefinas*. “Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos”, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-CSIC, March 2008.
- *Viscoelasticidad lineal y topología molecular en polietilenos: efecto de la estructura del catalizador*, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid, March 2008.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO / COURSES, CONGRESSES, AND SEMINARS ORGANIZED BY THE INSTITUTE

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

Guillermo A. Mena Marugán.

- o *Cosmología cuántica de lazos*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 14 March 2008.
- o *Estalmat: A Visit to CSIC*, organizer of the doors open day for the Estalmat participants, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 31 May 2008.

Luis J. Garay Elizondo.

- o *Física de agujeros negros*, VIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 18 November 2008.

5.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

M^a José García Borge.

- o *El núcleo: un viaje al centro de la Materia*, VIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20 November 2008.
- o *Estudio de núcleos exóticos: dinámica y estructura*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12-14 March 2008.

Carlos Cabrillo.

- o *Física Molecular de atmósferas y plasmas*, *La Física de la Materia Desordenada*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12-14 March 2008.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano Torres

- o *European Master on Advanced Spectroscopy in Chemistry*, Erasmus Mundus Programme of the EU, Université des Sciences et Technologies de Lille (France) and Universität Leipzig (Germany), Member of the organizing committee, 2008.

Víctor J. Herrero

- o *19th European Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases (19th ESCAMPIG)*, Granada, Member of the organizing committee, 15-20 July 2008.

Isabel Tanarro Onrubia

- o *Plasmas a baja temperatura*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.
- o *Visita al Laboratorio de Plasmas*, doors open day for the Estalmat participants, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 31 May 2008.
- o *19th European Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases (19th ESCAMPIG)*, Member of the organizing committee, Granada, Spain, 15-20 July 2008.
- o *Los Plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión*, VIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 19 November 2008. <http://hdl.handle.net/10261/8894>

José Luis Doménech Martínez.

- o *¿Cómo ayuda la espectroscopia láser al estudio de las atmósferas?*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.

José M. Fernández Sánchez.

- o *Espectroscopia Raman en chorros supersónicos*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.

Julio Santos Gómez.

- o *Control cuántico de procesos moleculares*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.

Oscar Gálvez González

- o *Hielo en el universo: de la Tierra al medio interestelar*, VIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 17 November 2008.

Carlo di Lauro

- o *Rotación Interna en los Rotores Asimétricos: La Banda Infrarroja ν_6 del 1,1,1-difluor-cloro-etano*, Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid, 2 July 2008.

5.3.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Almudena Alonso Herrero

- o *MiniSIDE Kick-off Meeting*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-25 March 2008.
- o *SIDE/miniSIDE Meeting*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13-14 November 2008.

5.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Santiago Sánchez Cortés.

- o *Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.

José A. Sánchez Gil.

- o *Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 March 2008.
- o *Nanoantenas metálicas como sensores moleculares*, VIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 17 November 2008.

5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Víctor Cruz Cañas, (IEM), Rafael Notario (IQFR), Sonia Martínez (CTI), and Javier Ramos (IEM).

- o *2º Encuentro de computación de alto rendimiento para simulaciones moleculares*. Partners: Instituto de Estructura de la Materia, Instituto de Química Física Rocasolano and Centro Técnico de Informática, CSIC, 3 June 2008.

Aurora Nogales Ruiz.

- o *V Curso de Introducción a la Investigación en Estructura de la Materia*, Organizer, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12-14 March 2008.

Juan Francisco Vega Borrego (IEM), J. Franco (Universidade de Minho), A. Guerrero (Universidad de Sevilla); J. Muñoz (Universidad de Huelva), A. Santamaría (Universidad del País Vasco), J.M. Pereña (ICTP), and R. Steinbrügen (Instrumentos Físicos Ibérica).

- o *Iberian Meeting on Rheology-IBEREO2008*, Partners: Sociedad Portuguesa de Reología y Grupo Especializado de Reología de las RSEF y RESQ y CSIC, Madrid, 18-19 September 2008.

Mari Cruz García-Gutiérrez.

- o *Macromoléculas a escala nanométrica: autoensamblaje versus multifuncionalidad*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, March 2008.

Javier Ramos Díaz

- o *Laboratorio virtual en física macromolecular*, “V Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, March 2008.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

5.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Javier Bermejo Barrera.

- Member of *ESS-Bilbao Initiative Executive Commission*.
- Member of the *International Advisory Board*, “Conferences on Liquid and Amorphous Metals”.

M^a José García Borge.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* of the Exotic Nuclei and Atomic Masses, Rhyn (Poland).

Carlos Cabrillo García.

- Member of the *Scientific Committee* for the collage 6 structure and dynamics of liquid and glasses of Instituto Laue Langevin (ILL), Grenoble (France).
- Member of the *Scientific Committee* for Congress FisEs'08.

Elvira Moya de Guerra.

- President of the *National Committee of Evaluation of Research Activity* (CNEAI) of Physics and Mathematics, Madrid (Spain).
- Vicepresident of the *Accreditation Committee of Science Professors* (ANECA).

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza.

- *Adjunct Professor* of the Lethbrige University, Lethbrige (Canada).

Concepción Domingo Maroto.

- Adjoint Coordinator of the *Physics Area*, CSIC (from July 2008).
- Member of the *Board of Directors* of the European Optical Society (EOS).
- Spanish Representative in the *COST Action D42*: "Chemical Interactions between Cultural Artefacts and Indoor Environment (EnviArt)" (Program "Chemistry and Molecular Sciences and Technologies", CSMT).
- Spanish Representative in the *COST Action MP0603*: "Chemical Imaging by Means of CARS-Microscopy (MicroCARS)" (Program "Materials, Physical and Nanosciences", MPNS).

Rafael Escribano Torres.

- Member of the *Scientific Committee* of the Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Brussels (Belgium).
- Member of the *External Evaluation Committee* for Chemistry Units, Fundação para a Ciencia e a Tecnologia-FCT (Portugal), 16-28 February 2008.

Víctor José Herrero.

- Member of the *Experts Committee (Chemistry)* of the Spanish Ministry of Science and Innovation.
- Secretary of the *Spanish Alexander von Humboldt Association*.
- Member of the *Executive Board* of the Asociación Española de Vacío (ASEVA).

Salvador Montero Martín.

- Member of the *Editorial Board* of the Journal of Raman Spectroscopy, Wiley (UK).
- Member of the *Habilitation Jury* of Irina Graur, Université Polytechnique de Provence, Marseille (France), June 2008.

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the *Executive Board* of the Asociación Española de Vacío (ASEVA).

Guzmán Tejeda Gala.

- Secretary of the *Sociedad Española de Óptica* (SEDOPTICA).

5.4.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Santiago Arribas Mocoroa

- Member of the *Scientific Advisory Committee* of the Calar Alto Astronomical Observatory (CAHA).
- Member of the *Scientific Advisory Working Group* for the 2nd. Generation of GTC Instruments.
- Member of the *Astronomical Infrastructure Network Working Group on Instrumentation for Large Telescopes*.
- Member of the *JWST/NIRSpec Instrument Science Team*.

Luis Colina Robledo.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* of the ESO/ESA European Virtual Observatory.

- Member of the *European Southern Observatory* (ESO) Time Allocation Committee.
- *European coPI* of the JWST/MIRI instrument.
- Member of the *JWST/MIRI Advisory Working Group*.
- Member of the *JWST/MIRI Instrument Science Team*.
- Member of the *GTC/CanariCam Instrument Science team*.

Almudena Alonso Herrero

- Member of the *NASA/ESA Hubble Space Telescope* (HST) Time Allocation Committee.
- Member of the *GTC/CanariCam Instrument Science Team*.
- Member of the *JWST/MIRI Instrument Science Team*.
- Member of the *Selection Committee* (ANEP) for the Ramón y Cajal, and Juan de la Cierva Postdoctoral Positions, Madrid, June 2008.

Álvaro Labiano Ortega

- Member of the *Scientific Organizing Committee* of the “4th GPS/CSS Workshop” in Riccione, Italy, May 2008

5.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

José Vicente García Ramos

- *Vicepresidente Adjunto de Programación Científica del CSIC* (*Adjunct Vicepresident for Scientific Planning, CSIC*).

Santiago Sánchez Cortés

- Member of the *Editorial Board* of the journal “Vibrational Spectroscopy”.
- *Gold Medal* of the Faculty of Science at Kosice University (Slovakia) for the scientific and pedagogical collaboration between the Instituto de Estructura de la Materia and the Biophysics Department, awarded 5 November 2008.

5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

- Member of the *Board of the Society* for International Studies (SEI), Madrid.
- *Honorary Member* of the Akademie Mitteldeutsche Kunststoffinnovationen, Merseburg, Germany.
- Member of the *Royal Academy of Sciences*, Barcelona.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Applied Polymer Science”.
- Member of *Editorial Board* of the “International Journal of Polymeric Materials”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Polymer Engineering”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Macromolecular Science-Physics”.
- Member of *Editorial Board* of the journal “e-Polymers”.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

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

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* (SAC) of the French Synchrotron SOLEIL (France), since December 2005.
- Member of *Review Panel Committee* "Soft Condensed Matter and Scattering" of HASYLAB, DESY, Hamburg (Germany), since October 2006.
- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Peer Review Committee 3*, Chemistry, Condensed matter, Nano-chemistry, Soft condensed matter of the French Synchrotron SOLEIL, since January 2008.

- Member of the *Beamline Review Panel BM16*, European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France, 19-21 May 2008.
- Member of the *International Advisory Committee* of the “5th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and Its Applications”, Lyon, 26-29 August 2008.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Member of the *Board of Directors* of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE).
- Member of the *Scientific Advisory Committee* of the International Symposium: Polymer and Materials Chemistry, Kathmandu (Nepal).

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Informes de transferencia tecnológica

F. Tabarés, I. Tanarro, V.J. Herrero, J.A. Ferreira, and C. Gómez Aleixandre.
Final Report on EFDA Task TW6-TPP- GAPOX.

Asociación EURATOM-CIEMAT en el Marco del Programa Tecnológico de European Fusion Development Agreement (EFDA)-2006 (May 2008).

5.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Estancias de investigadores del instituto en empresas:

Luis Colina Robledo

Lugar / Place: Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA)

Fechas / Dates: January-December 2008 (one day per week).

Finalidad / Objective: Development of MIRI Telescope Simulator for the MIRI/JWST instrument.

5.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Ponente / Speaker: Juan Francisco Vega Borrego.

Título / Title: Polymer Physics at GEMPPPO.

Colaboración / Collaboration: **IEM/Dow Chemicals**

Lugar / Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha / Dates: 29 April 2008.

Ponente / Speaker: Nuria Robledo Alvaro.

Título / Title: Study of the Relationships between Solid-State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low-Density Polyethylene and other Polyolefins.

Colaboración / Collaboration: **IEM/Dow Chemicals**

Lugar / Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha / Dates: 29 April 2008.

Reuniones de transferencia de tecnología

Asistentes /Meeting attendees: Amelia Linares Dos Santos y Tiberio Ezquerra.

Colaboración / Collaboration: **Grupo Antolín Ingeniería S.A.**

Lugar/Place: Instituto de Estructura de la Materia.

Fecha/ Dates: April, 2008.

Asistentes /Meeting attendees: Amelia Linares Dos Santos.
Lugar/Place: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Salamanca.
Colaboración / Collaboration: **Grupo Antolín Ingeniería S.A.**
Fecha / Dates: November, 2008.

Informes de transferencia tecnológica

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrego, and Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the Relationships between Solid-State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low-Density Polyethylene and other Polyolefins.
Dow Chemicals, May 2008.

Juan Francisco Vega Borrego, Jon Otegui de la Fuente, and Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Long Chain Branching in Polyethylenes: Determination of the Degree of Branching Using Rheological Measurements.
Repsol-YPF, September 2008.

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

5.6.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Unidades asociadas / Associated units

- *Unidad Asociada* “Grupo de Investigación de Estructura de la Materia” between IEM, CSIC (Main researcher M^a José G^a Borge) and “Dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Huelva” (Main researcher Ismael Martel Bravo), approved in June 2005 until June 2008.
- *Unidad Asociada* “Grupo de Investigación de Física Nuclear” between IEM, CSIC (Main researcher Pedro Sarriguren) and “Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad Complutense de Madrid” (Main researcher Elvira Moya de Guerra), approved in 2007.
- *Unidad Asociada* between IEM, CSIC (Main researcher Jorge Dukelsky Bercovich) and “Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla” (Main researcher Joaquín Gómez Camacho), approved in May 2007 until May 2010.
- *Unidad Asociada* “Grupo de Física Aplicable” between IEM, CSIC (Main researcher Fco. Javier Bermejo Barrera) and “Dpto. de Electricidad y Electrónica de la Universidad del País Vasco” (Main researcher José Manuel Barandiarán), extension approved for the period December 2005 - December 2008.

Otras Actividades / Other activities

Jorge Dukelsky Bercovich. Short stays:

- o Institute of Nuclear Physics and Nuclear Energy, Bucharest, Romania, 27-31 October 2008.
- o Labotatory GANIL, Caen, Paris, France, 1-5 December 2008.
- o University of Orsay, France, 8-12 December 2008.

Mariano Carmona Gallardo.

- o *Course “Iniciación a Geant 4”* (Attendance), Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC), Barcelona, Spain, 18-23 May 2008.

José Antonio Briz.

- o *Course “Iniciación a Geant 4”* (Attendance), Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC), Barcelona, Spain, 18-23 May 2008.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades asociadas / Associated units

- *Unidad Asociada* “Química Física Molecular” between IEM, CSIC (Main researcher Víctor J. Herrero) and “Dpto. de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid” (Main researcher F. Javier Aoiz), extended for 2006-2009.
- *Unidad Asociada* between IEM, CSIC (Main researcher Rafael Escibano) and “Dpto. de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén” (Main researcher M. Fernández), extended for 2007-2010.

5.6.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Otras Actividades / Other activities

Almudena Alonso Herrero. Short stay:

- o Department of Astrophysics, University of Cologne, Cologne, Germany, 3-9 December 2008.

Daniel Miralles Caballero.

- o *The Third NEON Archive Observing School* (Attendance), ESO, Garching, Germany, 27 August-6 September 2008.

5.6.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Unidades asociadas / Associated units

- *Unidad Asociada* between IEM, CSIC (Main researcher José V. García Ramos) and “Grupo de Espectroscopia y Estructura Molecular del Departamento de Química Física de la Universidad de Málaga”.
- *Unidad Asociada* between IEM, CSIC (Main researcher José V. García Ramos) and “Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía de la Universidad de Valladolid”.

5.6.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras Actividades / Other activities

Francisco J. Baltá Calleja.

- o Short stay: HASYLAB, Hamburg, Germany, 13-17 October 2008.
- o *Users Meeting Hamburg* (Attendance), DESY, Hamburg, Germany, 22-25 January 2008.
- o *Interaction of Free-Electron-Laser Radiation with Matter: Recent Experimental Achievements, Challenges for Theory* (Attendance), DESY, Hamburg, Germany, 8-10 October 2008.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana. Short stays:

- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-26 November 2008.
- o Centro de Supercomputación de Barcelona (BSC), Barcelona, Spain, 4-5 December 2008.

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- o Institute Laue-Langevin, Grenoble, France, 11-13 May and 17-19 November 2008.
- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-27 June 2008.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stay:

- o European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-27 July 2008.

Fernando Ania García. Short stays:

- o State University at Stony Brook and NSLS (Brookhaven), NY, U.S.A., 14-22 April 2008.
- o ESRF, Grenoble, France, 24-29 June 2008.
- o HASYLAB, Hamburg, Germany, 13-17 October 2008.
- o ESRF, Grenoble, France, 22-26 November 2008.

Víctor Cruz Cañas.

- o Short stay: Centro de Supercomputación de Barcelona (BSC), Barcelona, Spain, 4 and 5 December 2008.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- o Short stay: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 24-29 June 2008 and 22-26 November 2008.
- o Short stay: HASYLAB, Hamburg, Germany, 13-17 October 2008.
- o *Iª Reunión Nacional de Microespectroscopía Infrarroja con Radiación Sincrotrón – MIRAS* (Attendance), Madrid, Spain, 14-15 April 2008.

Amelia Linares Dos Santos.

- o Short stay: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-27 July 2008.

Aurora Nogales Ruiz.

- o Institute Laue-Langevin, Grenoble, France, 17-19 November 2008.
- o *Advances in Polymer & Neutron Scattering – In Honour of Dame Julia Higgins* (Attendance), Imperial College London, London, United Kingdom, 14-15 September 2008.

Mari Cruz García-Gutiérrez.

- o Short stay: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-27 July 2008.

Alejandro Sanz Parras.

- o *Advances in Polymer & Neutron Scattering – In Honour of Dame Julia Higgins* (Attendance), Imperial College London, London, United Kingdom, 14-15 September 2008.

Jaime Javier Hernández Rueda.

- o Short stay: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 22-27 July 2008.
- o *Iª Reunión Nacional de Microespectroscopía Infrarroja con Radiación Sincrotrón – MIRAS* (Attendance), Madrid, Spain, 14-15 April 2008.

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

CHAPTER 6
PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION

6.1 PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI/JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. I. Agulló, J.F. Barbero G., J. Díaz, E. Fernández-Borja, and E.J.S. Villaseñor.
Black Hole State Counting in LQG: A Number Theoretical Approach.
Physical Review Letters **100**, 211301 (2008).
2. I. Agulló, J. Navarro-Salas, G.J. Olmo, and L. Parker.
Reexamination of the Power Spectrum in de Sitter Inflation.
Physical Review Letters **101**, 171301 (2008).
3. J.F. Barbero G., D. Gómez Vergel, and E.J.S. Villaseñor.
Quantum Unitary Evolution of Linearly Polarized $S1 \times S2$ and $S3$ Gowdy Models Coupled to Massless Scalar Fields.
Classical and Quantum Gravity **25**, 085002 (2008).
4. J.F. Barbero G., I. Garay, and E.J.S. Villaseñor.
Classical and Quantum Behavior of Dynamical Systems Defined by Functions of Solvable Hamiltonians.
American Journal of Physics **76**, 153 (2008).
5. J.F. Barbero G. and E.J.S. Villaseñor.
Generating Functions for Black Hole Entropy in Loop Quantum Gravity.
Physical Review D **77**, 121502(R) (2008).
6. J.F. Barbero G., I. Garay, and E.J.S. Villaseñor.
Quantum Einstein-Rosen Waves: Coherent States and n -Point Functions.
Classical and Quantum Gravity **25**, 205013 (2008).
7. E. Bentivegna and T. Pawłowski.
Anti-deSitter Universe Dynamics in LQC.
Physical Review D **77**, 124025 (2008).
8. J. Cortez, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock Representation of the Gowdy $S1 \times S2$ and $S3$ Models.
Classical and Quantum Gravity **25**, 105005 (2008).
9. D. Gómez Vergel.
Schrodinger Quantization of Linearly Polarized Gowdy $S1 \times S2$ and $S3$ Models Coupled to Massless Scalar Fields.
Classical and Quantum Gravity **25**, 175016 (2008).
10. D. Gómez Vergel and E.J.S. Villaseñor.
Unitary Evolution of Free Massless Fields in de Sitter Space-Time.
Classical and Quantum Gravity **25**, 145008 (2008).
11. J. González and E. Perfetto.
Critical Currents in Graphene Josephson Junctions.
Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 145218 (2008).
12. J. González and E. Perfetto.
Unconventional Quasiparticle Lifetime in Graphene.
Physical Review Letters **101**, 176802 (2008).
13. J. González.
Kohn-Luttinger Superconductivity in Graphene.
Physical Review B **78**, 205431 (2008).

14. M. Martín-Benito, L.J. Garay, and G.A. Mena Marugán.
Hybrid Quantum Gowdy Cosmology: Combining Loop and Fock Quantizations.
Physical Review D **78**, 083516 (2008).
15. M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and T. Pawłowski.
Loop Quantization of Vacuum Bianchi I Cosmology.
Physical Review D **78**, 064008 (2008).
16. J.M. Martín-García, D. Yllanes, and R. Portugal.
The Invar Tensor Package: Differential Invariants of Riemann.
Computer Physics Communications **179**, 586 (2008).
17. J.M. Martín-García.
xPerm: Fast Index Canonicalization for Tensor Computer Algebra.
Computer Physics Communications **179**, 597 (2008).
18. G.J. Olmo.
Reexamination of Polytropic Spheres in Palatini $f(R)$ Gravity.
Physical Review D **78**, 104026 (2008).
19. E. Perfetto and J. González.
Electronic Instabilities of a Hubbard Model Approached as a Large Array of Coupled Chains.
Physical Review B **77**, 054504 (2008).

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

20. Yu Aksyutina, H. Johansson, P. Aldrich, T. Aumann, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, Th. W. Elze, H. Emling, J. Fernández-Vazquez, C. Forssén, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, M. Hellström, G. Ickert, K.L. Jones, B. Jonson, A. Kliemkiewicz, J.V. Kratz, R. Kulessa, M. Lantz, T. Lebleis, Y. Leifels, A. Lindahl, K. Mahata, M. Matos, M. Meister, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, R. Palit, M. Pantea, W. Prokopowicz, R. Reifarth, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, H. Simon, J. Stroth, K. Sümmerer, O. Tengblad, E. Wajda, W. Walus, H. Weick, and M.V. Zhukov.
Lithium Isotopes beyond the Drip Line.
Physics Letters B **666**, 430-434 (2008).
21. J. Alonso, J. Gutierrez, J.M. Barandiaran, F.J. Bermejo, and L. Brey.
Monte Carlo Simulations of Magnetic Order in Fe-Doped Manganites.
6th International Symposium on Hysteresis and Modeling Micromagnetics.
Physica B-Condensed Matter **403** (2-3), 394-397 (2008).
Conference: 6th International Symposium on Hysteresis and Modeling Micromagnetics.
22. R. Álvarez-Rodríguez, E. Garrido, A.S. Jensen, D.V. Fedorov, and H.O.U. Fynbo.
Triple Charged-Particle Decays of Resonances Illustrated by ^{12}C -States.
Journal of Physics G **35**, 014010 (2008).
Conference: 3rd Europhysics Conference on Nuclear Physics in Astrophysics.
23. R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, E. Garrido, D.V. Fedorov, and H.O.U. Fynbo.
Momentum Distributions of α -Particles from Decaying Low-Lying ^{12}C -Resonances.
Physical Review C **77**, 064305 (2008).
24. R. Álvarez-Rodríguez, H.O.U. Fynbo, A.S. Jensen, and E. Garrido.
Distinction between Sequential and Direct Three-body Decays.
Physical Review Letters **100**, 192501 (2008).
25. R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, and E. Garrido.
 α -Particle Momentum Distributions from ^{12}C Decaying Resonances.
International Journal of Modern Physics E **17**, 2188-2193 (2008).
Conference: Workshop on State of the Art in Nuclear Cluster Physics.

26. F.J. Bermejo, F. Fernández-Alonso, and C. Cabrillo.
Multiple Time Scales in the Microscopic Dynamics of Simple and Complex Liquids as Studied by Radiation Scattering.
Condensed Matter Physics **11**, 95-106 (2008).
27. F.J. Bermejo, C. Cabrillo, E. Bychkov, P. Fouquet, G. Ehlers, W. Haussler, D.L. Price, and M.L. Saboungi.
Tracking the Effects of Rigidity Percolation down to the Liquid State: Relaxational Dynamics of Binary Chalcogen Melts.
Physical Review Letters **78**, 245902 (2008).
28. B. Blank and M.J.G. Borge.
Nuclear Structure at the Proton Drip Line: Advances with Nuclear Decay Studies.
Progress in Particle and Nuclear Physics **60**, 403-483 (2008).
29. R. Boutami, M.J.G. Borge, H. Mach, L.M. Fraile, K. Gulda, A.J. Aas, L.M. García-Raffi, E. Hagebø, W. Kurcewicz, G. Løvholden, T. Martínez, B. Rubio, J.L. Taín, and O. Tengblad.
Nuclear Structure of ^{231}Ac .
Nuclear Physics A **811**, 244-275 (2008).
30. R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.
Cluster Sum Rules for Three-Body Systems with Angular Dependent Interactions.
Physical Review C **77**, 024001 (2008).
31. J. Dukelsky, B. Errea, S. Lerma H., G. G. Dussel, C. Esebbag, and N. Sandulescu.
Exactly Solvable Neutron-Proton Hamiltonians and Quartet Correlations.
Journal of Modern Physics E **17**, 2155 (2008).
Conference: Workshop on State of the Art in Nuclear Cluster Physics.
32. C. Eleon, P. Jardin, J.C. Thomas, et al.
Measurement of the Ar Diffusion Coefficient in Graphite at High Temperature by the ISOL Method.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B – Beam Interactions with Materials and Atoms **266**, 4284 (2008).
Conference: 15th International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Techniques Related to their Applications.
33. F. Fernández-Alonso, F.J. Bermejo, I. Bustinduy, M.A. Adams, and J.W. Taylor.
Spin Dynamics in Liquid and Rotationally Disordered Solid Oxygen.
Physical Review B **78**, 104303 (2008).
34. C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra, and J.M. Udías.
Crossing Symmetry and Phenomenological Widths in Effective Lagrangian Models of the Pion Photoproduction Process.
Physics Letters B **660**, 188-192 (2008).
35. C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra, A. Udías, and J.M. Udías.
Properties of Nucleon Resonances by Means of a Genetic Algorithm.
Physical Review C **77**, 065212- 1-11 (2008).
36. D. Galaviz, A.M. Amthor, D. Bazin, et al.
New Experimental Efforts along the rp -Process Path.
Journal of Physics G – Nuclear and Particle Physics **35**, 014030 (2008).
Conference: 3rd Europhysics Conference on Nuclear Physics in Astrophysics.
37. E. Garrido, A.S. Jensen, and D.V. Fedorov.
Necessary Conditions for Accurate Computations of Three-Body Partial Decay Widths.
Physical Review C **78**, 034004 (2008).
38. E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, and H.O.U. Fynbo.
Isospin Mixing in Three-body Systems.
Few-body Systems **44**, 167-169 (2008).
Conference: 20th European Conference on Few-Body Problems in Physics.

39. E. Goikolea, J.S. Garitaonandia, M. Insausti, J. Lago, I.G. de Muro, J. Salado, F.J. Bermejo, and D. Schmool.
Evidence of Intrinsic Ferromagnetic Behavior of Thiol Capped Au Nanoparticles Based on μ SR Results.
Journal of Non-Crystalline Solids **354** (47-51), 5210 (2008).
Conference: 9th International Workshop on Non Crystalline Solids.
40. S. Hyldegaard, H.O.U. Fynbo, K. Riisager, S. Brandenburg, P. Dendooven, K. Jungmann, C. J. G. Onderwater, A. Rogachevskiy, M. Sohani, E. Traykov, H. W. Wilschut, J. Buscher, M. Huyse, R. Raabe, M. Alcorta, M. J. G. Borge, M. Madurga, O. Tengblad, C. A. A. Diget, B.R. Fulton, A.S. Jokinen, K. Perajarvi, A. Saastamoinen, J. Aysto, B. Jonson, and G. Nyman.
Studies of C-12 Using Beta-Decays.
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics **17**, 2182-2187 (2008).
Conference: Workshop on State of the Art in Nuclear Cluster Physics.
41. M.V. Ivanov, M.B. Barbaro, J.A. Caballero, A.N. Antonov, E. Moya de Guerra, and M.K. Gaidarov.
Superscaling and Charge-Changing Neutrino Scattering from Nuclei in the Δ Region beyond the Relativistic Fermi Gas Model.
Physical Review C **77**, 034612- 1-8 (2008).
42. M. Jimenez-Ruiz, M.D. Ruiz-Martin, G.J. Cuello, R. Fernández-Perea and F. J. Bermejo.
High Frequency Collective Excitations in Molten Fe/Ni Alloys Studied by Inelastic Neutron Scattering.
Journal of Alloys and Compounds **452**, 140 (2008).
Conference: 12th International IUPAC Conference on High Temperature Materials Chemistry.
43. A. Jungclaus, V. Modamio, J.L. Egido, R. Schwengner, A. Algara, D. Bazzacco, D. Escrig, M.A. Fernández, L.M. Fraile, S. Lenzi, N. Marginean, T. Martínez, D.R. Napoli, and C.A. Ur.
Revised and Extended Level Scheme of the Doubly-Odd Nucleus ^{188}Ir .
Physical Review C **77**, 024310 (2008).
44. A.I. Krivchikov, A.N. Yushchenko, O.A. Korolyuk, f.J. Bermejo, R. Fernández-Perea, I. Bustinduy, and M.A. González.
Effects of Resonant Phonon Scattering from Internal Molecular Modes on the Thermal Conductivity of Molecular Glasses.
Physical Review B **77**, 024202 (2008).
45. M. Madurga, M.J.G. Borge, J.C. Angelique, L. Bao, U.C. Bergmann, A. Buta, J. Cederkll, C.Aa. Diget, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, H.B. Jeppesen, B. Jonson, F. Marechal, F. Marqués, T. Nilsson, G. Nyman, F. Perrot, K. Riisager, O. Tengblad, E. Tengborn, M. Turrión, and F. Wilhelmsen.
Study of Beta-Delayed 3-Body and 5-Body Breakup Channels Observed in the Decay of ^{11}Li .
Nuclear Physics A **810**, 1-12 (2008).
46. D.F. Martínez, R.A. Molina, and B. Hu.
Length-Dependent Oscillations of the dc-Conductance in Laser-Driven Quantum Wires.
Physical Review B **78**, 045428 (2008).
47. I. Matea, J. Souin, J. Aysto, et al.
Precise Half-Life Measurement of the Si-26 Ground State.
European Physical Journal A **37**, 151 (2008).
48. R.A. Molina and P. Schmitteckert.
Critical Parameters of the CDW - Luttinger Liquid Transitions Based on the Bond Entropy.
Physica B **403**, 1287 (2008).
Conference: International Conference on Strongly Correlated Electron Systems.
49. S. Pittel, G.G. Dussel, J. Dukelsky, and P. Sarriguren.
Cooper Pairs in Atomic Nuclei.
Revista Mexicana de Física S **54**, 110-114 (2008).
Conference: 31st Symposium on Nuclear Physics.
50. R. Raabe, A. Andreyev, M.J.G. Borge, L. Buchmann, P. Capel, H.O.U. Fynbo, M. Huyse, R. Kanungo, T. Kirchner, C. Mattoon, A.C. Morton, I. Mukha, J. Pearson, J. Ponsaers, J.J. Ressler, K. Riisager, C. Ruiz, G. Ruprecht, F. Sarazin, O. Tengblad, P. Van Duppen, and P. Walden.

- β -Delayed Deuteron Emission from ^{11}Li Decay of the Halo.*
Physical Review Letters **101**, 212501-1-4 (2008).
51. A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos, and P. Pérez-Fernández.
Decoherence as a Signature of an Excited-State Quantum Phase Transition.
Physical Review A **78**, 060102(R) (2008).
 52. A. Relaño, L. Muñoz, J. Retamosa, E. Faleiro, and R. A. Molina.
Power-Spectrum Characterization of the Continuous Gaussian Ensemble.
Physical Review E **77**, 031103 (2008).
 53. A. Relaño.
Chaos-Assisted Tunneling and $1/f^\alpha$ Noise in the Order-Chaos Transition Regime.
Physical Review Letters **100**, 224101 (2008).
 54. L.M. Robledo, R. Rodríguez-Guzman, and P. Sarriguren.
Evolution of Nuclear Shapes in Medium Mass Isotopes from a Microscopic Perspective.
Physical Review C **78**, 034314- 1-13 (2008).
 55. T.R. Rodríguez, J.L. Egido, and A. Jungclaus.
On the Origin of the Anomalous Behaviour of 2^+ Excitation Energies in the Neutron-Rich Cd Isotopes.
Physics Letters B **668**, 410 (2008).
 56. C. Romero-Redondo, E. Garrido, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.
Isomeric 0^- Halo-States in ^{12}Be and ^{11}Li .
Physics Letters B **660**, 32-36 (2008).
 57. C. Romero-Redondo, E. Garrido, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.
Three-Body Structure of Low-Lying ^{12}Be States.
Physical Review C **77**, 054313 (2008).
 58. A.M. Sánchez-Benítez, D. Escrig, M.A.G. Álvarez, M.V. Andrés, C. Angulo, M.J.G Borge, J. Cabrera, S. Cherubini, P. Demaret, J.M. Espino, P. Figuera, M. Freer, J.E. García-Ramos, J. Gmez-Camacho, M. Gulino, O.R. Kakuee, I. Martel, C. Metelko, A.M. Moro, F. Pérez-Bernal, K. Rusek, D. Smirnov, O. Tengblad, and V. Ziman.
Study of the Elastic Scattering of 6He on ^{208}Pb at Energies around the Coulomb Barrier.
Nuclear Physics A **803**, 30-45(2008).
 59. P. Sarriguren, R. Rodríguez-Guzman, and L.M. Robledo.
Shape Transitions in Neutron-Rich Yb, Hf, W, Os, and Pt Isotopes within a Skyrme Hartree-Fock+BCS Approach.
Physical Review C **77**, 064322- 1-9 (2008).
 60. M. Turrion, M. Eller, R. Catherall, et al.
Management of ISOLDE Yields.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B – Beam Interactions with Materials and Atoms **266**, 4274 (2008).
Conference: 15th International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Techniques Related to their Applications.

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

61. F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez Rábanos.
Cumulative Reaction Probabilities and Transition State Properties: A Study of the $\text{F}+\text{H}_2$ Reaction and Its Deuterated Isotopic Variant.
Journal of Chemical Physics **129**, 024305 (2008).
62. D. Carriazo, C. Domingo, C. Martín, and V. Rives.
PMo or PW Heteropoly Acids Supported on MCM-41 Silica Nanoparticles: Characterisation and FT-IR Study of the Adsorption of 2-Butanol.
Journal of Solid State Chemistry **181**, 2046-2057 (2008).

63. R. de Nalda, J. Durá, A. García-Vela, J.G. Izquierdo, J. González-Vázquez, and L. Bañares.
A Detailed Experimental and Theoretical Study of the Femtosecond A-Band Photodissociation of CH₃I.
Journal of Chemical Physics **128**, 244309/1-20 (2008).
64. J. Durá, R. de Nalda, J. Álvarez, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, and L. Bañares.
Femtosecond Transition State Imaging of the A-band CH₃I Photodissociation.
Chem PhysChem **9**, 1245 (2008).
65. O. Gálvez, B. Maté, V.J. Herrero, and R. Escibano.
Trapping and Adsorption of CO₂ in Amorphous Ice: A FTIR Study.
Icarus **197**, 599 (2008).
66. S. Gaspard, M. Oujja, R. Hesterman, P. Moreno, C. Méndez, A. García, C. Domingo, and M.Castillejo.
Interaction of Femtosecond Laser Pulses with Tempera Paints.
Applied Surface Science **255**, 2675-2681 (2008).
67. V.J. Herrero, A.M. Islyaikin, and I. Tanarro.
Use of Energy Distributions for the Identification of Species and Production Mechanisms in Low Pressure DC Discharges.
Journal of Mass Spectrometry **43**, 1148 (2008).
68. M. Jadraque, C. Domingo, and M. Martín.
Laser Induced Effects on ZnO Targets upon Ablation at 266 and 308 nm Wavelengths.
Journal of Applied Physics **104**, 024306/1-5 (2008).
69. P. Joubert, J. Bonamy, L. Gomez, and D. Bermejo.
N₂-H₂ Isotropic Raman Q-branch Linewidths: An Energy-Corrected Sudden Scaling Law.
Journal of Raman Spectroscopy **39**, 6, 707-710 (2008).
Conference: European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy.
70. F. Lattanzi, C. di Lauro, and J. van der Auwera.
Vibration-Rotation-Torsion Analysis of the High Resolution Infrared Spectrum of C₂H₆ between 1330 and 1610 cm⁻¹: The ν_6 , ν_8 , $\nu_4 + \nu_{12}$, $2\nu_4 + \nu_9$ Interacting System and Hot Transitions from ν_4 to $\nu_4 + \nu_8$.
Journal of Molecular Spectroscopy **248**, 134-145 (2008).
71. B. Maté, O. Gálvez, B. Martín-Llorente, M.A. Moreno, V.J. Herrero, R. Escibano, and E. Artacho.
Ices of CO₂/H₂O Mixtures. Reflection-Absorption IR Spectroscopy and Theoretical Calculations.
Journal of Physical Chemistry A **112**, 457 (2008).
72. R. Pouli, C. Fotakis, B. Hermosín, C. Sáiz-Jiménez, C. Domingo, M. Oujja, and M. Castillejo.
The Laser Induced Discoloration of Stonework; a Comparative Study on Its Origins and Remedies.
Spectrochimica Acta A **71**, 932-945 (2008).
73. I. Tanarro.
Emission Imaging of Pulsed Plasma Plumes Emerging through a Transversal Hole in the Hollow Cathode of a DC Reactor.
IEEE Transactions on Plasma Science **36**, 1002-3 (2008).
74. G. Tejeda, F. Thibault, J. M. Fernández, and S. Montero.
Low-Temperature Inelastic Collisions between Hydrogen Molecules and Helium Atoms.
Journal of Chemical Physics **128**, 224308/1-11 (2008).
75. F. Thibault, B. Corretja, A. Viel, D. Bermejo, R. Z. Martínez, and B. Bussery-Honvault.
Linewidths of C₂H₂ Perturbed by H₂: Experiments and Calculations from an ab Initio Potential.
Phys Chem Chem Phys **10** (35), 5419-28 (2008).
76. M. Walczak, M. Oujja, L. Crespo-Arcá, A. García, C. Méndez, P. Moreno, C. Domingo, and M. Castillejo.
Evaluation of Femtosecond Laser Pulse Irradiation of Ancient Parchment.
Applied Surface Science **255**, 3179-3183 (2008).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE EVPM DEPARTMENT

77. M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, J. D. Gómez-Varga, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Comparative SERS Effectiveness of Silver Nanoparticles Prepared by Different Methods: A Study of the Enhancement Factor and the Interfacial Properties.
Journal of Colloid and Interface Science **326**, 103-109 (2008).
78. C. Domingo, M. Álvarez de Buergo, R. Fort, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and M. García-Heras.
Possibilities of the Molecular Infrared and Raman Spectroscopies to Monitor the Polymerization Process of Water Repellents and Consolidants in Treated Stones.
Progress in Organic Coating **63**, 5-12 (2008).
79. L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles Using Bifunctional Viologens: Application to the SERS Detection of PAHs.
Journal of Physical Chemistry C **112**, 7527–7530 (2008).
80. Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
In Situ Detection of Flavonoids in Weld Dyed Wool and Silk Textiles by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Journal of Raman Spectroscopy **39**, 1309-1312 (2008).
81. D. Muñoz-Martín, H. Fernández, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Solis, J.L.G. Fierro, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Nonlinear Optical Susceptibility of Multicomponent Tellurite Thin Film Glasses.
Journal of Applied Physics **104**, 113510 (2008).

6.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

82. M. Agúndez, J. Cernicharo, and J.R. Goicoechea.
Formation of Simple Organic Molecules in Inner T Tauri Disk.
Astronomy & Astrophysics **483**, 831-837 (2008).
83. M. Agúndez, J. Cernicharo, M. Guelin, et al.
Search for Anions in Molecular Sources: C₄H- Detection in L1527.
Astronomy & Astrophysics **478**, L19-L22 (2008).
84. M. Agúndez, J. Cernicharo, J.R. Pardo, et al.
Tentative Detection of Phosphine in IRC+10216.
Astronomy & Astrophysics **485**, L33-L36 (2008).
85. M. Agúndez, J. Cernicharo, J.R. Pardo, et al.
Understanding the Chemical Complexity in Circumstellar Envelopes of C-Rich AGB Stars: The Case of IRC+10216.
Astrophysics and Space Science **313**, 229-233 (2008).
86. M. Agúndez, J.P. Fonfria, J. Cernicharo, et al.
Detection of Circumstellar CH₂CHCN, CH₂CN, CH₃CCH, and H₂CS.
Astronomy & Astrophysics **479**, 493-501 (2008).
87. A. Alonso-Herrero, P.G. Pérez-González, G.H. Rieke, D.M. Alexander, J.R. Rigby, C. Papovich, J.L. Donley, and D. Rigopoulou.
The Host Galaxies and Black Holes of Typical z=0.8-1.4 AGN.
Astrophysical Journal **677**, 127-136 (2008).
88. S. Arribas, L. Colina, A. Monreal-Iberos, J. Alfonso, M. García-Marín, and A. Alonso-Herrero.
VLT-VIMOS Integral Field Spectroscopy of Luminous and Ultraluminous Infrared Galaxies. I. The Sample and First Results.
Astronomy & Astrophysics **4799**, 687-702 (2008).

89. E. Bayet, C. Lintott, S. Viti, et al.
Tracing High-Density Gas in M82 and NGC 4038.
Astrophysical Journal Letters **685**, L35-L38 (2008).
90. D. Ben Abdallah, K.Hammami, F.Najar, N.Jaidane, Z.Ben Lakhdar, M.L.Senent, C.Chambaud, and M.Hochlaf.
Low Temperature Rate Constants for Rotational Excitations and De-Excitations of C₃ (¹Σ) by Collisions with He (¹S).
Astrophysical Journal **686**, 379-383 (2008).
91. J. Cernicharo, M. Guelin, M. Agúndez, et al.
Detection of C₅N and Vibrationally Excited C₆H in IRC+10216.
Astrophysical Journal Letters **688**, L83-L86 (2008).
92. J.P. Chaboureaud, N. Soehnle, J.P. Pinty, et al.
A Midlatitude Precipitating Cloud Database Validated with Satellite Observations.
Journal of Applied Meteorology and Climatology **47**, 1337 (2008).
93. C. Comito, P. Schilke, U. Endresfelder, et al.
High-Resolution mm Interferometry and the Search for Massive Protostellar Disks: The Case of Cep-A HW2.
Astrophysics and Space Science **313**, 59-63 (2008).
94. C.S. Contreras, R. Sahai, A.G. de Paz, et al.
Echelle Long-Slit Optical Spectroscopy of Evolved Stars.
Astrophysical Journal Supplement Series **179**, 166 (2008).
95. F. Daniel and J. Cernicharo.
Solving Radiative Transfer with Line Overlaps Using Gauss-Seidel Algorithms.
Astronomy & Astrophysics **488**, 1237-1247 (2008).
96. B. Davies, D.F. Figer, C.J. Law, et al.
The Cool Supergiant Population of the Massive Young Star Cluster RSGC1.
Astrophysical Journal **676**, 1016-1028 (2008).
97. E. Defer, C. Prigent, F. Aires, J.R. Pardo, et al.
Development of Precipitation Retrievals at Millimeter and Sub-Millimeter Wavelengths for Geostationary Satellites.
Journal of Geophysical Research – Atmospheres **113**, D08111 (2008).
98. T. Díaz-Santos, A. Alonso-Herrero, L. Colina, C. Packham, J. T. Radomski, and C. M. Telesco.
Understanding the 8Micron versus Pa-Alpha Relationship on Subarcsecond Scales in Luminous Infrared Galaxies.
Astrophysical Journal **685**, 211-224 (2008).
99. A. Eckart, F.K. Baganoff, M. Zamaninasab, et al.
Polarized NIR and X-Ray Flares from Sagittarius A.*
Astronomy & Astrophysics **479**, 625-639 (2008).
100. A. Eckart, R. Schodel, M. García-Marín, et al.
Simultaneous NIR/sub-mm Observation of Flare Emission from Sagittarius A.*
Astronomy & Astrophysics **492**, 337-344 (2008).
101. J.P. Fonfria, J. Cernicharo, M.J. Richter, et al.
A Detailed Analysis of the Dust Formation Zone of IRC+10216 Derived from Mid-Infrared Bands of C₂H₂ and HCN.
Astrophysical Journal **673**, 445-469 (2008).
102. M. Guelin, N. Brouillet, J. Cernicharo, et al.
Unveiling the Chemistry of Hot Protostellar Cores with ALMA.
Astrophysics and Space Science **313**, 45-51 (2008).

103. D.R. Hidalgo-Olguín, M. Villa, M.L. Senent and M.A. Mora-Delgado.
Ethane Internal Rotation Vibrational Hamiltonian.
Journal of Mexican Chemical Society **52** (1), 98-102 (2008).
104. N. Inostroza, M.Hochlaf, M.L. Senent, and R.Letelier.
Ab Initio Characterization of the Linear SiC₃ Isomers.
Astronomy & Astrophysics **486** (3), 1047-1052 (2008).
105. N. Inostroza, J. R. Letelier, P. Fuentealba, and M.L.Senent.
Theoretical Ro-Vibrational Spectrum of CF⁺.
Spectrochim Acta A **71**, 798-802 (2008).
106. I. Jiménez-Serra, P. Caselli, J. Martín-Pintado, et al.
Parametrization of C-Shocks. Evolution of the Sputtering of Grains.
Astronomy & Astrophysics **482**, 549-559 (2008).
107. I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, et al.
Revealing the "Fingerprints" of the Magnetic Precursor of C-Shocks.
Astrophysics and Space Science **313**, 159-163 (2008).
108. P. Kaaret, and A. Alonso-Herrero.
X-Ray Sources in the Star-Forming Galaxies NGC4294 and NGC754.
Astrophysical Journal **682**, 1020-1038 (2008).
109. E. Kankare, S. Mattila, S. Ryder, M. A. Pérez-Torres, A. Alberdi C. Romero-Canizales, T. Díaz-Santos, P. Vaisanen, A. Efstathiou, A. Alonso-Herrero, L. Colina, and J. Kotilainen.
Discovery of a Very Highly Extinguished Supernova in a Luminous Infrared Galaxy.
Astrophysical Journal **689**, L97-L100 (2008).
110. A. Labiano.
Tracing Jet-ISM Interaction in Young AGN: Correlations between [OIII] 5007 and 5-GHz Emission.
Astronomy and Astrophysics **488**, 59 (2008).
111. A. Labiano, C.P. O'Dea, P.D. Barthel, W.H. de Vries, and S.A. Baum.
Star Formation in the Hosts of GPS and CSS Radio Galaxies.
Astronomy and Astrophysics, **477**, 491 (2008).
112. B. Lefloch, J. Cernicharo, and J.R. Pardo.
Star Formation in the Trifid Nebula - Cores and Filaments.
Astronomy & Astrophysics **489**, 157-U134 (2008).
113. M.R. Lerate, J. Yates, S. Viti, et al.
Physical Parameters for Orion KL from Modelling Its ISO High-Resolution Far-IR CO Line Spectrum.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **387**, 1660-1668 (2008).
114. S. Martin, M.A. Requena-Torres, J. Martín-Pintado, et al.
Tracing shocks and photodissociation in the galactic center region.
Astrophysical Journal **678**, 245-254 (2008).
115. S. Martin, M.A. Requena-Torres, J. Martín-Pintado, et al.
The Galactic Center as Nearby Extragalactic Chemical Laboratory.
Astrophysics and Space Science **313**, 303-306 (2008).
116. N.L. Martin-Hernandez, A. Bik, E. Puga, et al.
Spatially Resolved Near-Infrared Spectroscopy of the Massive Star-Forming Region IRAS 19410+2336.
Astronomy & Astrophysics **489**, 229 (2008).
117. J. Puls, J.S. Vink, and F. Najarro.
Mass Loss from Hot Massive Stars.
Astronomy and Astrophysics Review **16**, 209-325 (2008).

118. C. Quillen, J. Bland-Hawthorn, J. D. Green, J. D. Smith, D. A. Prasad, A. Alonso-Herrero, K. Cleary, M. H. Brookes, and C. R. Lawrence.
Spitzer Space Telescope Infrared Spectrograph Mapping of the Central Kpc of Centaurus A.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **384**, 1469-1482 (2008).
119. M.A. Requena-Torres, J. Martín-Pintado, S. Martín, et al.
The Galactic Center: The Largest Oxygen-Bearing Organic Molecule Repository.
Astrophysical Journal **672**, 352-360 (2008).
120. R. Sahai, M. Claussen, C.S. Contreras, et al.
High-Velocity Interstellar Bullets in IRAS 05506+2412: A Very Young Protostar.
Astrophysical Journal **680**, 483 (2008).
121. R. Sahai, K. Findeisen, A. G. de Paz, et al.
Binarity in Cool Asymptotic Giant Branch Stars: A Galex Search for Ultraviolet Excesses.
Astrophysical Journal **689**, 1274 (2008).
122. R. Sahai, K. Young, N. Patel, et al.
A Massive, Dusty Toroid with Large Grains in the Pre-Planetary Nebula IRAS 22036+5306.
Astrophysics and Space Science **313**, 241 (2008).
123. K.L. Shapiro, R. Genzel, N.M.F. Schreiber, L.J. Tacconi, N. Bouché, G. Cresci, R. Davies, F. Eisenhauer, P.H. Johansson, D. Krajnović, D. Lutz, T. Naab, N. Arimoto, S. Arribas, A. Cimatti, L. Colina, E. Daddi, O. Daigle, D. Erb, O. Hernández, Xu Kong, M. Mignoli, M. Onodera, A. Renzini, A. Shapley, and C. Steidel.
Kinematics of SINS High-Redshift Star-Forming Galaxies: Distinguishing Rotating Disks from Major Mergers.
Astrophysical Journal **682**, 231-251 (2008).
124. P. Thaddeus, C.A. Gottlieb, H. Gupta, et al.
Laboratory and Astronomical Detection of the Negative Molecular Ion C₃N⁻.
Astrophysical Journal **677**, 1132-1139 (2008).
125. Yazidi, A. Ben Houria and Z. Ben Lakhdar, M.L. Senent, and M. Hochlaf.
Electronic Structure and Spectroscopy of MgO₂⁺ Cation.
Chemical Physics **348**, 215-226 (2008).
126. Q.F. Zhu, R.P. Kudritzki, D.F. Figer, et al.
Radial Velocities of Stars in the Galactic Center.
Astrophysical Journal **681**, 1254-1278 (2008).

6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

127. S.A. Brandan, G. Benzel, J.V. Garcia-Ramos, et al.
Theoretical and Experimental Study of the Vibrational Spectra of 1,5-Dimethylcytosine.
Vibrational Spectroscopy **46**, 89 (2008).
128. J.J. Camacho, L. Diaz, M. Santos, D. Reyman, and J.M.L. Poyato.
Optical Emission Spectroscopic Study of Plasma Plumes Generated by IR CO₂ Pulsed Laser on Carbon Targets.
Journal of Physics D: Applied Physics. **41**, 105201 (13 pp) (2008).
129. J.J. Camacho, M. Santos, L. Díaz, and J.L.M. Poyato.
Optical Emission Spectroscopy of Oxygen Plasma Induced by IR CO₂ Pulsed Laser.
Journal of Physics D: Applied Physics. **41**, 215206 (13 pp) (2008).
130. P. Carmona, A. Rodríguez-Casado, I. Alvarez, E. De Miguel, and A. Toledano.
FTIR Microspectroscopic Analysis of the Effects of Certain Drugs on Oxidative Stress and Brain Protein Structure.

- Biopolymers **89**, 548-554 (2008).
131. G. Corrado, S. Sánchez-Cortés, O. Francioso, and J.V. García-Ramos.
Surface-Enhanced Raman and Fluorescence Joint Analysis of Soil Humic Acids.
Analytica Chimica Acta **624**, 69-77 (2008).
 132. V. Giannini and J.A. Sánchez-Gil.
Excitation and Emission Enhancement of Single Molecule Fluorescence through Multiple Surface Plasmon Resonances on Metal Trimer Nanoantennas.
Optical Letters **33**, 899-891 (2008).
(Selected for *The Virtual Journal of Biomedical Optics* **3** (2008) and the *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology* **17** (2008)).
 133. L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, P. Leyton, A.E. Aliaga, J.S. Gómez-Jeria, J. Cárcamo, and M.M. Campos-Vallette.
Functionalization of Ag Nanoparticles with the Bis-Acridium Lucigenin as a Chemical Assembler: Detection of Persistent Organic Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Analytica Chimica Acta **624**, 286-293 (2008).
 134. A.M. Herrero, I. Cambero, J.A. Ordóñez, L. De la Hoz, and P. Carmona.
Raman Spectroscopy Study of the Structural Effect of Microbial Transglutaminase on Meat Systems.
Food Chemistry **109**, 25-32 (2008).
 135. A.M. Herrero, P. Carmona, S. Cofrades, and J. Jiménez-Colmenero.
Raman Spectroscopic Determination of Structural Changes in Meat Batters upon Soy Protein Addition and Heat Treatment.
Food Research International **41**, 765-772 (2008).
 136. A.M. Herrero, P. Carmona, I. López-López, and F. Jiménez-Colmenero.
Raman Spectroscopic Evaluation of Meat Batter Structural Changes Induced by Thermal Treatment and Salt Addition.
Journal of Agricultural and Food Chemistry **56**, 7119-7124 (2008).
 137. I. Iriepa, J. Bellanato, E. Galvez, et al.
Synthesis, Structural and Conformational Study of Some Amides Derived from 3-Methyl-3-Azabicyclo[3,2,1]Octan-8 Alpha(Beta)-Amines.
Journal of Molecular Structure **886**, 59 (2008).
 138. G. Lajos, D. Jancura, P. Miskovsky, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
Surface-Enhanced Fluorescence and Raman Scattering Study of Antitumoral Drug Hypericin: An Effect of Aggregation and Self-spacing Depending on pH.
Journal of Physical Chemistry C **112**, 12974-12980 (2008).
 139. P. Leyton, I. Córdova, P.A. Lizama-Vergara, J.S. Gómez-Jeria, A.E. Aliaga, M.M. Campos-Vallette, E. Clavijo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
Humic Acids as Molecular Assemblers in the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.
Vibrational Spectroscopy **46**, 77-81 (2008).
 140. M.R. Lopez-Ramirez, L. Guerrini, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
Vibrational Analysis of Herbicide Diquat: A Normal Raman and SERS Study on Ag Nanoparticles.
Vibrational Spectroscopy **48**, 58-64 (2008).
Conference: 4rd International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy.
 141. G. Martínez-Niconoff, J.A. Sánchez-Gil, H. H. Sánchez, and A. Pérez Leija.
Self-Imaging and Caustics in Two-Dimensional Surface Plasmon Optics.
Optics Communication **281**, 2316-2320 (2008).
 142. G. Martínez-Niconoff, J.C. Ramírez-San-Juana, J. Muñoz-López, P. Martínez-Vara, A. Carbajal-Domínguez, and J.A. Sánchez-Gil.
Spatial filtering Dark Hollow Beams.
Optics Communication **281**, 3237-3240 (2008).

143. J. Pola, M. Urbanová, M. Santos, L. Díaz, and J. Subrt.
IR Laser-Induced Co-Decomposition of Trisilane and Thiirane for Deposition of Polycarbosilthiane Films.
Journal of Analytical and Applied Pyrolysis **81**, 225-230 (2008).
144. T.M. Rümke, J.A. Sánchez-Gil, O. L. Muskens, M.T. Borgström, E.P.A.M. Bakkers, and J. Gómez Rivas.
Local and Anisotropic Excitation of Surface Plasmon Polaritons by Semiconductor Nanowires.
Optics Express **16**, 5013-5021 (2008).
(Selected for the Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology **17** (2008))
145. I. Sánchez-González, P. Carmona, P. Moreno, J. Borderías, I. Sánchez-Alonso, A. Rodríguez-Casado, and M. Careche.
Protein and Water Structural Changes in Fish Surimi during Gelation as Revealed by Isotopic H/D Exchange and Raman Spectroscopy.
Food Chemistry **106**, 56-64 (2008).
146. A. Toledano, M.I. Álvarez, I. Caballero, P. Carmona, and E. De Miguel.
Immunohistochemical Increase in Cyclooxygenase-2 without Apoptosis in Different Brain Areas of Subchronic Nicotine- and D(+)-Amphetamine-Treated Rats.
Journal of Neural Transmission **115**, 1093-1108 (2008).
147. A. Torreggiani, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, and M. Tamba.
Spectroscopic and Pulse Radiolysis Studies of the Antioxidant Properties of (+) Catechin: Metal Chelation and Oxidizing Radical Scavenging.
Journal of Raman Spectroscopy **39**, 265-275 (2008).
Conference: 20th Italian Conference on Raman Spectroscopy and Nonlinear Effects.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

- M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, J. D. Gómez-Varga, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Comparative SERS Effectiveness of Silver Nanoparticles Prepared by Different Methods: A Study of the Enhancement Factor and the Interfacial Properties.
Journal of Colloid and Interface Science **326**, 103-109 (2008).
- C. Domingo, M. Álvarez de Buergo, R. Fort, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, and M. García-Heras.
Possibilities of the Molecular Infrared and Raman Spectroscopies to Monitor the Polymerization Process of Water Repellents and Consolidants in Treated Stones.
Progress in Organic Coating **63**, 5-12 (2008).
- L. Guerrini, J.V. García-Ramos, C. Domingo, and S. Sánchez-Cortés.
Building Highly Selective Hot Spots in Ag Nanoparticles Using Bifunctional Viologens: Application to the SERS Detection of PAHs.
Journal of Physical Chemistry C **112**, 7527-7530 (2008).
- Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. García-Ramos, and S. Sánchez-Cortés.
In Situ Detection of Flavonoids in Weld Dyed Wool and Silk Textiles by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Journal of Raman Spectroscopy **39**, 1309-1312 (2008).
- D. Muñoz-Martín, H. Fernández, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Solis, J.L.G. Fierro, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Nonlinear Optical Susceptibility of Multicomponent Tellurite Thin Film Glasses.
Journal of Applied Physics **104**, 113510 (2008).

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

148. Al Abou-Kandel, A. Flores, F.J. Baltá-Calleja, et al.
Microindentation Technique as a Tool for Investigating the Development of Order in PET under Uniaxial Stress.
Journal of Polymer Research **15**, 373 (2008).

149. R. Adhikari, C. Damm, G.H. Michler, H. Münstedt, and F.J. Baltá Calleja.
Processing and Mechanical Performance of SBS Block Copolymer/Layered Silicate Nanocomposites.
Composite Interfaces **15**(5), 453-463 (2008).
150. F. Ania, I. Puente-Orench, F.J. Baltá Calleja, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer, and S.V. Roth.
Ultra-Small-Angle X-Ray Scattering Study of PET/PC Nanolayers Relating to AFM Results.
Macromolecular Chemistry and Physics **209**(13), 1367-1373 (2008).
151. R. Arteaga-Müller, J. Sánchez-Nieves, J. Ramos, P. Royo, and M.E.G. Mosquera.
Isolobal Zwitterionic Niobium and Tantalum Imido and Zirconium Monocyclopentadienyl Complexes: Theoretical and Methyl Methacrylate Polymerization Studies.
Organometallics **27**, 1417-1426 (2008).
152. M.A. Barrera, J.F. Vega, and J. Martínez-Salazar.
Three Dimensional Modelling of Flow Curves in Co-Rotating Twin Screw Extruder Elements.
Journal of Materials Processing Technology **197** (1-3) 221-224 (2008).
153. F. Blanco, I. Alkorta, J. Elguero, V. Cruz, B. Abarca, and R. Ballesteros.
[1,2,3]Triazolo[1,5-a]Pyridines. A Theoretical (DFT) Study of the Ring-Chain Isomerization.
Tetrahedron **64**, 11150-11158 (2008).
154. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, S. Khellaf, D. Benachour, and F.J. Baltá Calleja.
Structure and Properties of New Reversibly Crosslinked iPP/LDPE Blends.
Journal of Applied Polymer Science **109**(2), 795-804 (2008).
155. M. Brasse, J. Cámpora, P. Palma, E. Alvarez, V. Cruz, J. Ramos, and M.L. Reyes.
Nickel 2-Iminopyridine N-Oxide (PymNox) Complexes: Cationic Counterparts of Salicylaldimine-Based Neutral Ethylene Polymerization Catalysts.
Organometallics **27**, 4711-4723 (2008).
156. I.G. Economou, E.K. Karakatsani, G.-E. Logotheti, J. Ramos, and A.A. Vanin.
Multi scale Modeling of Structure, Dynamic and Thermodynamic Properties of Imidazolium-based Ionic Liquids: Ab initio DFT Calculations, Molecular Simulation and Equation of State Predictions.
Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP **63**, 283-293 (2008).
157. M.T. Expósito, J.F. Vega, J. Ramos, J. Osío-Barcina, A. García-Martínez, C. Martín, and J. Martínez-Salazar.
Highly Active Ethylene/Hydroxyl Comonomers Copolymerization using Metallocene Catalysts.
Journal of Applied Polymer Science **109** (3), 1564-1569 (2008).
158. L. Fernández-Ballester, T. Gough, F. Meneau, W. Bras, F. Ania, F.J. Baltá Calleja, and J.A. Kornfield.
Simultaneous Birefringence, Small and Wide Angle X-Ray Scattering to Detect Precursors and Characterize Morphology Development during Flow-Induced Crystallization of Polymers.
Journal of Synchrotron Radiation, **15**(2), 185-190 (2008).
159. A. Flores, M. Pieruccini, U. Nöchel, N. Stribeck, and F.J. Baltá Calleja.
Recrystallization Studies in Isotropic Cold Crystallized PET: Influence of Heating Rate.
Polymer **49**(4), 965-973 (2008).
160. M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, A. Nogales, P. Panine, D.R. Rueda, and T.A. Ezquerro.
Influence of Shear on the Templated Crystallization of Poly(butylene terephthalate)/Single Wall Carbon Nanotube Nanocomposites.
Macromolecules **41**, 844-851 (2008).
161. S. Gómez-Ruiz, D. Polo-Cerón, S. Prashar, M. Fajardo, V.L. Cruz, J. Ramos, and E.M. Hey-Hawkins.
Synthesis, Characterization and Catalytic Behaviour of Ansa-Zirconocene Complexes Containing Tetraphenylcyclopentadienyl Rings. X-Ray Crystal Structures of $[\text{Zr}\{\text{Me}_2\text{Si}(\eta^5\text{-C}_5\text{Ph}_4)(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_3\text{R})\}\text{Cl}_2]$ ($\text{R} = \text{H}, \text{Bu}^t$).
Journal of Organometallic Chemistry **693**, 601-610 (2008).

162. A. Linares, J.C. Canalda, M. E. Cagiao, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, I. Martín-Gullón, J. Vera, and T.A. Ezquerra.
Broad-Band Electrical Conductivity of High Density Polyethylene Nanocomposites with Carbon Nanoadditives: Multiwall Carbon Nanotubes and Carbon Nanofibers.
Macromolecules **41**, 7090–7097 (2008).
163. A. Linares, M.J. Cánovas, and T.A. Ezquerra.
Nearly Constant Loss Behaviour in Ionomers.
J. Chem. Phys. **128**, 244908-1 (2008).
164. J. Martínez, V. Cruz, J. Ramos, S. Gutiérrez-Oliva, J. Martínez-Salazar, and A. Toro-Labbé.
On the Nature of the Active Site in Bis(imino)Pyridyl Iron, a Catalyst for Olefin Polymerization.
Journal of Chemical Physics **112**, 5023-5028 (2008).
165. C. Navio, J. Alvarez, María J. Capitán, F. Yndurain, and R. Miranda.
Nonmagnetic γ -FeN Thin Films Epitaxially Grown on Cu(001): Electronic Structure and Thermal Stability.
Physical Review B **78**, 155417 (2008).
166. M. Pieruccini, A. Flores, U. Nöchel, G. Di Marco, N. Stribeck, and F.J. Baltá Calleja.
The Role of the Amorphous Phase in the Recrystallization Process of Cold Crystallized PET.
European Physical Journal E **27**(4), 365-373 (2008).
167. J. Ramos, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, and D. Theodorou.
Entanglement Relaxation Time in Polyethylene: Simulation versus Experimental Data.
Macromolecules **41**, 2959-2962 (2008).
168. M. Soccio, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, N. Lotti, A. Munari, and T.A. Ezquerra.
Origin of the Subglass Dynamics in Aromatic Polyesters by Labeling the Dielectric Relaxation with Ethero Atoms.
Macromolecules **41**, 2651–2655 (2008).
169. J.F. Vega, S. Martín, M.T. Expósito, and J. Martínez-Salazar.
Entanglement Network and Relaxation Temperature Dependence of Single-Site Catalyzed Ethylene/1-Hexene Copolymers.
Journal of Applied Polymer Science **109** (3), 1529-1534 (2008).
170. J.F. Vega, J. Otegui, M.T. Expósito, M. López, C. Martín, and J. Martínez-Salazar.
Structure and Physical Properties of Polyethylenes Obtained from Dual Catalysis Process.
Polymer Bulletin **60**, 331-342 (2008).
171. J.F. Vega, D. Polo-Cedón, S. Gómez-Ruiz, S. Prashar M. Fajardo, and J. Martínez-Salazar.
Viscoelasticity and Macromolecular Topology in Polyethylene: Effect of the Catalyst Structure.
Journal Materials Science Letters **43**, 1745-1748 (2008).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR-ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

6.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

1. M^a José G^a Borge y Alfredo Poves.
Estructura Nuclear: a la búsqueda de los límites.
Revista Española de Física **22**, n^o1, 4-13 (2008).

6.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

2. J.C. Canalda and A. Linares.
Litografía por nanoimpresión.
Rev. Plast. Mod. **96**, 128-136 (2008).

6.3 **LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS** **/ BOOKS, PROCEEDINGS, AND OTHER PUBLICATIONS**

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

1. J.F. Barbero G., I. Garay, and E.J.S. Villaseñor.
Einstein-Rosen Waves Coupled to Matter.
“11th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity”, 2677-2679 (World Scientific, Singapore, 2008).
ISBN 978-981-283-426-3.
2. J.F. Barbero G.
Quantum Geometry and Quantum Gravity.
Geometry and Physics: XVI International Fall Workshop, R. L. Fernandes and R. Picken (editors).
AIP Conference Proceedings **1023**, 3-33 (2008).
3. D. Brizuela, J. M. Martín-García, and G.A. Mena Marugán.
High-Order Perturbations of Spherical Spacetimes.
“11th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity”, 2671-2673 (World Scientific, Singapore, 2008).
ISBN 978-981-283-426-3.
4. A. Corichi, J. Cortez, and G.A. Mena Marugán.
Unitary Quantization of the Gowdy T3 Cosmology.
“11th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity”, 1627-1629 (World Scientific, Singapore, 2008).
ISBN 978-981-283-426-3.
5. E.J.S. Villaseñor.
Introduction to Quantum Mechanics.
Geometry and Physics: XVI International Fall Workshop, R. L. Fernandes and R. Picken (editors).
AIP Conference Proceedings **1023**, 107-117 (2008).
6. J.M. Martín-García, D. Yllanes, and R. Portugal.
Invar: Computer Algebra for the Invariants of the Riemann Tensor.
EAS Publications Series **30**, 223-226 (2008).

6.3.2 **DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS**

7. L. Acosta, D. Escrig, D. Galaviz, A.M. Sánchez-Benítez, C. Angulo, M. A. G. Alvarez, M.V. Andres, M. J. G. Borge, E. Casarejos, J.M. Espino, J.E. García-Ramos, J. Gomez-Camacho, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, F. Perez-Bernal, D. Rodriguez, K. Rusek, and O. Tengblad.
Near-Barrier Scattering of He-6 and Be-11.
Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions- FINUSTAR 2.
AIP Conference Proceedings **1012**, 333-337 (2008)
ISBN 978-0-7354-0532-5.
8. R. Álvarez Rodríguez, A.S. Jensen, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, and E. Garrido.
Decay of Low-Lying ^{12}C Resonances within a 3α Cluster Model.
9th International Conf. On clustering aspects of nuclear structure and dynamics (Clusters '07).
Journal of Physics: Conference Series **111**, 012017 (2008).
DOI 10.1088/1742-6596/111/1/012017.
9. M.J.G. Borge.
Beta-Delayed Charged Particle Studies: Peering into Nuclear Structure.
Chapter of the book “Karlsruher Nuklidkarte: Commemoration of the 50th Anniversary”.
Luxemburg: Office for Official Publications of the European Communities.
ISBN 978-92-79-09115-5.

10. H.O.U. Fynbo, C. Aa Diget, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, H.H. Knudsen, O. Kirsebom, K. Riisager, M. Alcorta, R. Boutami, M.J.G. Borge, M. Madurga, O. Tengblad, S. Brandenburg, P. Dendooven, K. Jungmann, G.J.G. Onderwater, A. Rogachevsky, M. Sohani, E. Traykov, H.W. Wilschut, J. Büscher, P. van Duppen, M. Huyse, R. Raabe, T. Eronen, J. Huikari, A. Jokinen, A. Kankainen, K. PeraJärvi, I. Moore, A. Nieminen, H. Penttilä, S. Rinta-Antila, A. Saastamoinen, Y. Wang, J. Äystö, B. Jonson, T. Nilsson, G. Nyman, K. Wilhelmsen, B. Fulton, S. Fox, and F.C. Barker.
The β -Decay Approach for Studying ^{12}C .
Proc. of 9th Int. Conf. on Clustering aspects of Nuclear Structure and Dynamics (IOP Publishing).
Journal of Physics: Conference Series **111**, 012003 (2008).
DOI [10.1088/1742-6596/111/1/012003](https://doi.org/10.1088/1742-6596/111/1/012003).
11. M.V. Ivanov, M.B. Barbaro, J.A. Caballero, A.N. Antonov, E. Moya de Guerra, and M.K. Gaidarov.
Superscaling and Charge-Changing Neutrino Scattering from Nuclei in the Δ -Region beyond the Relativistic Fermi Gas Model.
Nuclear Theory **27**, 79-94 (Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria, 2008).
ISSN 1313-2822.
12. A.S. Jensen, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, R. Alvarez Rodríguez, and E. Garrido.
Dynamic Evolution of Three-body Decaying Resonances.
Physics of Unstable Nuclei: Proceedings of the International Symposium on the ISPUN07, 84-9
Eds. D.T. Khoa, P. Egelhof, S. Gales, N. Van Giai, T. Motobayashi, World Scientific (2008).
ISBN: 978-981-277-614-3.
13. A.S. Jensen, R. Alvarez Rodríguez, E. Garrido, D.V. Fedorov, and H.O.U. Fynbo.
Are Sequential and Direct Decays Distinguishable?
9th International Conf. on clustering aspects of nuclear structure and dynamics (Clusters '07).
Journal of Physics: Conference Series **111**, 012035 (2008).
DOI:10.1088/1742-6596/111/1/012035.
14. M. Madurga, M.J.G. Borge, H.O.U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager, and O. Tengblad.
 β Delayed Particle Studies of the Halo Nucleus ^{11}Li and the Core ^9Li .
Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions- FINUSTAR 2.
AIP Conference Proceedings **1012**, 193-197 (2008).
ISBN 978-0-7354-0532-5.
15. M. Madurga, M.J.G. Borge, J.C. Angelique, L. Bao, U. Bergmann, A. Buta, J. Cederkäll, C.Aa. Diget, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, H. B. Heppesen, B. Jonson, F. Maréchal, F.M. Marqués, T. Nilsson, G. Nyman, F. Perrot, K. Riisager, O. Tengblad, E. Tengborn, M. Turrión and K. Wilhelmsen.
Study of β -Delayed Charged Particle Emission of ^{11}Li : Evidence of New Decay Channels.
9th International Conference on Clustering Aspects of Nuclear Structure and Dynamics (IOP Publishing)
Journal of Physics: Conference Series **111**, 012024 (2008).
DOI 10.1088/1742-6596/111/1/012024.
16. P. Maierbeck, R. Gernhäuser, R. Krücken, T. Kröll, H. Alvarez-Pol, F. Aksouh, T. Aumann, K. Behr, E.A. Benjamim, J. Benlliure, V. Bildstein, M. Böhmer, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Brünle, A. Bürger, M. Caamano, E. Casarejos, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina Gil, J. Enders, K. Eppinger, T. Faestermann, J. Friese, L. Fabbietti, M. Gascon, H. Geissel, J. Gerl, M. Gorska, P.G. Hansen, B. Jonson, R. Kanungo, O. Kiselev, I. Kojouharov, A. Klimkiewicz, T. Kurtukian, N. Kurz, K. Larsson, T. Le Bleis, K. Mahata, L. Maier, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Perez, A. Prochazka, C. Rodriguez-Tajes, D. Rossi, H. Schaffner, G. Schrieder, S. Schwertel, H. Simon, B. Sitar, M. Stanoiu, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, and S. Winkler.
Probing the Single Particle Structure around ^{54}Ca with One-Neutron Knock-Out.
Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions- FINUSTAR 2.
AIP Conference Proceedings **1012**, 89-93 (2008).
ISBN 978-0-7354-0532-5.
17. O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udías, T.W. Donnelly, and I. Sick.
Nuclear and Nucleon Contributions to the Parity Violating Electron Scattering.
Nuclear Theory **27**, 107-118 (Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria, 2008)
ISSN 1313-2822.

18. A. Muñoz, J.C. Oller, F. Blanco, J.D. Gorfinkiel, P. Limmao-Vieira, A. Maira-Vidal, M.J.G. Borge, O. Tengblad, C. Huerga, M. Téllez, and G. García.
Energy Deposition Model Based on Electron Scattering Cross Section Data from Water Molecules.
24th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases.
Journal of Physics: Conference Series **133**, 012002 (2008).
DOI 10.1088/1742-6596/133/1/012002.
ISSN 1742-6588(Print). ISSN 1742-6596 (Online).
19. J. Okolowicz, M. Ploszajczak, and J. Dukelsky.
Degeneracies in a Non-Integrable Pairing Model.
Nuclear Theory **27**, 227-236 (Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria, 2008).
ISSN 1313-2822.
20. P. Sarriguren, M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, and A.N. Antonov.
Neutron Skins in Exotic Nuclei from Skyrme Hartree-Fock Calculations.
Nuclear Theory **27**, 181-192 (Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria, 2008)
ISSN 1313-2822.
21. P. Sarriguren, M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, and A.N. Antonov.
Neutron Skins in Spherical and Deformed Nuclei from Skyrme Hartree-Fock Calculations.
Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions, FINUSTAR2.
AIP Conference Proceedings **1012**, 255-259 (2008).
ISBN 978-0-7354-0532-5.

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

22. J.M. Fernández, J.P. Fonfría, A. Ramos, G. Tejeda, S. Montero, and F. Thibault.
Inelastic Collisions of N_2 , H_2 , and H_2+He Mixtures in Supersonic Jets by Raman Spectroscopy.
Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, T. Abe Ed.
AIP Conference Proceedings **1084**, 571-576 (2008).
ISBN: 978-0-7354-0615-5.
23. S. Gaspard, M. Oujja, M. Castillejo, P. Moreno, C. Méndez, A. García, and C. Domingo.
Femtosecond Laser Cleaning of Paintings; Modification of Tempera Paints by Femtosecond Laser Irradiation.
Lasers in the Conservation of Artworks, 41-47, M. Castillejo et al. Eds. (Taylor & Francis Group, London 2008).
ISBN: 978-0-415-47596-9.
24. H. Grothe, H. Tizek, and I.K. Ortega.
Metastable Nitric Acid Hydrates – Possible Constituents of Polar Stratospheric Clouds?
Faraday Discussions **137**, 223-234 (2008).
25. S. Montero.
Raman Spectroscopic Experiments on Boltzmann Collision Integral in Supersonic Jets.
Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, T. Abe Ed.
AIP Conference Proceedings **1084**, 3-11 (2008).
ISBN: 978-0-7354-0615-5.
26. M.M. Sanz and I. Tanarro.
Plasmas Basic Concepts and Nitrogen Containing Plasmas.
Nitrides and Dilute Nitrides: Growth, Physics and Devices, Chap. 2, J. Miguel-Sánchez Ed. (Transworld Research, Kerala, India, 2008).
ISBN: 81-7895-250-5
27. F.L. Tabarés, J.A. Ferreira, D. Tafalla, I. Tanarro, V.J. Herrero, I. Méndez, C. Gómez-Aleixandre, and J.M. Albella.
Cleaning Efficiency of Carbon Films by Oxygen Plasmas in the Presence of Metallic Getters.
Proceedings of the IVC-17/ICSS-13 and ICN+T 2007 Congress, L.S.O. Johansson et al. Eds.

Journal of Physics: Conference Series **100**, 062025 (2008).
 DOI: 10.1088/1742-6596/100/6/062025.
 ISSN: 1742-6588.

28. F.L.F. Thibault, B. Corretja, A. Viel, D. Bermejo, R.Z. Martinez, and B. Bussery-Honvault.
Linewidths of C₂H₂ Perturbed by H₂: Calculations from an ab Initio Potential and Comparison with Experimental Results.
 Spectral Line Shapes Vol. 15, M.A. Gigoso and M.A. González Eds.
 AIP Conference Proceedings **1058**, 131-133 (2008).
 ISBN: 978-0-7354-0588-2.
29. F. Thibault, L. Gomez, R.Z. Martinez, and D. Bermejo.
Collisional Line Widths of Autoperturbed N₂: Measurements and Quantum Calculations.
 Spectral Line Shapes Vol. 15, M.A. Gigoso and M.A. González Eds.
 AIP Conference Proceedings **1058**, 155-157 (2008).
 ISBN: 978-0-7354-0588-2.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE EVPM DEPARTMENT

30. C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
Determinación de pigmentos y tintes orgánicos in situ mediante espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas.
 Preprints of the 17th International Meeting on Heritage Conservation, P. Roig et al. Eds.,
 (Conselleria de Cultura i Esport, Generalitat Valenciana, Valencia, 2008).
 ISBN: 978-84-482-5069-0.
31. Z. Jurasekova, M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Aplicaciones de la espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas (SERS) a la determinación de pigmentos y tintes orgánicos de interés en el Patrimonio Cultural.
 La Investigación sobre Patrimonio Cultural, 169-181, C. Sáiz, M.A. Rogerio Eds.
 (Red Temática del CSIC de Patrimonio Histórico y Cultural, Seville, 2008).
 ISBN: 978-84-691-0049-3.

6.3.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

32. A. Alonso-Herrero
Typical AGN at Intermediate Redshifts.
 Observational Evidence for Black Holes in the Universe: Proceedings of the 2nd Kolkata Conference on
 Observational Evidence for Black Holes in the Universe.
 AIP Conference Proceedings, Volume **1053**, 25-28 (2008).
33. T. de Graauw, N. Whyborn, F. Helmich, et al.
The Herschel-Heterodyne Instrument for the Far-Infrared (HIFI).
 Space Telescopes and Instrumentation 2008.
 Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) **7010**, 1004-1004 (2008).
34. K.H. Hinkle, L. Wallace, M.J. Richter, et al.
Ethylene in the circumstellar envelope of IRC+10216.
 IAU: Organic Matter in Space.
 IAU Symposium and Colloquium Proceedings Series **251**, 161-162 (2008).
35. N.A. Levenson, C.C. Packham, A. Alonso-Herrero, et al.
Science of Active Galactic Nuclei with the GTC and Canari-Cam.
 Ground-Based and Airborne Instrumentation for Astronomy II.
 Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) **7014**, I142-I142 (2008).
36. R. Maiolino, S. Arribas, et al.
Tracing Metallicities in the Universe with the James Webb Space Telescope.
 The Metal-Rich Universe, edited by Garik Israelian and Georges Meynet.

Series: Cambridge Contemporary Astrophysics. Published by Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 212 (2008).
ISBN-13 978-0-521-87998-9.

37. V. Ossenkopf, M. Guerin, R. Guesten, et al.
Prospectives of Herschel PDR Observations.
Far-Infrared Workshop 2007.
EAS Publication Series **31**, 193-194 (2008).
38. J.R. Rigby, G.H. Rieke, J.L. Donley, A. Alonso-Herrero, and P.G. Pérez-González.
Why X-Ray Selected AGN Appear Optically Dull.
The Second Annual Spitzer Science Center Conference: Infrared Diagnostics of Galaxy Evolution.
ASP Conference Series **381**, 438-441 (2008).
ISBN: 978-1-58381-325-6.
39. N. Rodríguez-Eugenio, K.G. Noeske, J. Acosta-Pulido, R. Barrena, F. Prada, A. Manchado, and the EGS Team.
LIRIS Multi Slit H Alpha Spectroscopy of a z=1 DEEP2 Sample of Star-Forming Galaxies.
The Second Annual Spitzer Science Center Conference: Infrared Diagnostics of Galaxy Evolution.
ASP Conference Series **381**, 230-234 (2008).
ISBN: 978-1-58381-325-6.
40. J.T. Usero, S. Garcia-Burrillo, J. Martin-Pintado, et al.
Large-Scale Molecular Shocks in Starburst and Active Galaxies.
Far-Infrared Workshop 2007.
EAS Publication Series **31**, 117-122 (2008).
41. W. Wild, T. de Graauw, F. Helmich, et al.
ESPRIT – A Study Concept for a Far-Infrared Interferometer in Space.
Optical and Infrared Interferometry.
Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) **7013**, R132-R132 (2008).
42. G.S. Wright, G. Reike, P. Barella, et al.
Design and Development of MIRI, the Mid-IR Instrument for JWST.
Space Telescopes and Instrumentation 2008.
Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) **7010**, T100-T100 (2008).

6.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

43. M. Careche, J.B. Luten, A. Kole, R. Schelvis, F. Saura-Calixto, O.E. Scholten, M.E. Díaz-Rubio, M.A.J. Toonen, E. Schram, A.J. Borderias, I. Sánchez-Alonso, P. Carmona, I. Sánchez-González, T.R. Gormley, J. Oehlenschläger, S. Mierke-Klemeyer, E.O. Elvevoll, M.L. Nunes, N. Bandarra, I. Stoknes, E.H. Larsen.
Developing Functional Seafood Products.
Improving Seafood Products for the Consumer, Chapter 17 (Woodhead Publishing Limited, Cambridge, 2008).
ISBN: 978-1-84569-019-9.

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE EVPM DEPARTMENT

C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, and J.V. García-Ramos.
Determinación de pigmentos y tintes orgánicos in situ mediante espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas.
Preprints of the papers of the 17th International Meeting on Heritage Conservation, P. Roig et al Eds., (Conselleria de Cultura i Esport, Generalitat Valenciana, Valencia 2008).
ISBN: 978-84-482-5069-0.

Z. Jurasekova, M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, and J.V. García-Ramos.
Aplicaciones de la espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas nanoestructuradas (SERS) a la determinación de pigmentos y tintes orgánicos de interés en el Patrimonio Cultural.

La Investigación sobre Patrimonio Cultural, 169-181, C. Sáiz, M.A, Rogerio Eds.
(Red Temática del CSIC de Patrimonio Histórico y Cultural, Sevilla 2008).
ISBN: 978-84-691-0049-3.

6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

44. F.J. Baltá Calleja.
Radiación Sincrotrón.
Gran Enciclopedia Universal, Durvan S.A. de Ediciones, Vizcaya (España), 2008, **36** (Apéndice), 203-207 (2008).

6.4 TESIS DOCTORALES / PhD THESES

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

Título / Title: **Cuantización de ondas de Eisntein-Rosen acopladas con materia**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: 22 May 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando / Candidate: **Iñaki Garay Elizondo.**

Director / Supervisor: **Jesús Fernando Barbero González and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.**

6.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Título / Title: **Nuclear Structure Studies in the Vicinity of the Doubly-Magic ^{132}Sn Nucleus.**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: 24 October 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Doctorando / Candidate: **Lucia Cáceres.**

Director / Supervisor: **Andrea Jungclaus and J. Luis Egido.**

6.4.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Título / Title: **Ab Initio Spectroscopic Study of Carbon Chains C_4 , C_5 and C_6 .**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: March 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando / Candidate: **Helena Massó González.**

Director / Supervisor: **María Luisa Senent Diez.**

6.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Título / Title: **Structural and Rheological Study of Gelated Products Elaborated from Surimi and Dietary Fibre.**

Universidad / University: Facultad de Veterinaria, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha / Date: 23 May 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando / Candidate: **Ignacio Sánchez González.**

Director / Supervisor: **Pedro Carmona Hernández and Mercedes Careche Recacoechea.**

Título / Title: **Disociación multifotónica infrarroja del bromuro de vinilo. Estudio espectroscópico y en tiempo real.**

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

Fecha / Date: 26 November 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando / Candidate: Bousselham Samoudi.

Director / Supervisor: Magna Santos Greve and Luis Díaz Sol.

6.5 TESISAS, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER / GRADUATE DIPLOMAS AND MASTER THESES

6.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA / NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS

Título / Title: **Estudio de la estructura de los estados ligados ^{12}Be .**

Universidad / University: Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha / Date: 17 September 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: Carolina Romero Redondo.

Director / Supervisor: Eduardo Garrido Bellido.

Título / Title: **Estudio de la estructura a espín moderado en ^{188}Os y ^{188}Ir .**

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

Fecha / Date: 16 September 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: Victor Modamio Hoybjor.

Director / Supervisor: Andrea Jungclaus.

6.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Título / Title: **Estudio e interpretación de los espectros de vibración Infrarrojo, Raman y SERS de flavonoides.**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, UNED.

Fecha / Date: December 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: Zuzana Jurasekova.

Director / Supervisor: J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, and C. Domingo.

(Conjunta con EVPM / Together with EVPM Dep.)

Título / Title: **Estudio experimental de la agregación de para- H_2 por espectroscopia Raman.**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: 28 March 2008.

Calificación / Grade: Apto.

Diplomado / Candidate: Juan Hernández Morilla.

Director / Supervisor: José M. Fernández Sánchez.

6.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Título / Title: **Cinemática 2D de galaxias infrarrojas luminosas y ultraluminosas con VIMOS-VLT: El caso de IRAS F06076-2139**

Universidad / University: Departamento de Física Teórica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: 6 October 2006.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: Julia Alfonso Garzón.

Director / Supervisor: Santiago Arribas and Luis Colina.

Título / Title: **Characterization of galaxy clusters by the Sunyaev-Zel'dovich Effect.**

Universidad / University: Departamento de Astrofísica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha / Date: 24 November 2008.

Calificación / Grade: Matrícula de Honor.

Diplomado / Candidate: **Javier Piqueras López.**

Director / Supervisor: **Fernando Atrio-Barandela.**

6.5.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

Título / Title: **Fabricación de nanopartículas de plata funcionalizadas con viológenos para la detección de contaminantes mediante espectroscopía SERS.**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: September 2008

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: **Luca Guerrini**

Director / Supervisor: **J. V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés**

Título / Title: **Estudio e interpretación de los espectros de vibración Infrarrojo, Raman y SERS de flavonoides.**

Universidad / University: Facultad de Ciencias, UNED.

Fecha / Date: December 2008

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: **Zuzana Jurasekova.**

Director / Supervisor: **J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, and C. Domingo.**

(Conjunta con FM / Together with FM)

6.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Título / Title: **Caracterización reológica de poliolefinas de origen etilénico.**

Universidad / University: Departamento de Química Física, Facultad de Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha / Date: 22 September 2008.

Diplomado / Candidate: **Nuria Robledo Álvaro.**

Director / Supervisor: **Javier Martínez-Salazar and Juan Francisco Vega Borrego.**

Título / Title: **Structure and Properties relationship of Polymer Nanocomposites based on Carbon Nanotubes.**

Universidad / University: Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha / Date: 29 September 2008.

Calificación / Grade: Sobresaliente.

Diplomado / Candidate: **Jaime Javier Hernández Rueda.**

Director / Supervisor: **Mari Cruz García Gutiérrez and Tiberio Ezquerro Sanz.**

Título / Title: **Estudio de la estructura cristalina del polietileno mediante espectroscopía Raman y simulación por ordenador.**

Universidad / University: Departamento de Química Física, Facultad de Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha / Date: 22 September 2008.

Diplomado / Candidate: **Jon Otegui de la Fuente.**

Director / Supervisor: **Víctor Cruz Cañas and Juan Francisco Vega Borrego.**

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO / DATA COMPARED TO EXPECTATIONS FROM THE STRATEGIC PLAN

	Expected 2005	2005	Expected 2006	2006	Expected 2007	2007	Expected 2008	2008
Number of papers in SCI Journals	135	140	140	178	147	181	155	171
Number of papers in non-SCI Journals, proceedings and other publications	13	18	13	20	13	31	14	46
Total stock of PhD fellowships and contracts	23	32	24	39	25	40	25	41
Stock of postdoc fellowships and contracts	13	15	14	18	15	15	16	22
Number of PhD Theses defended	4	4	5	8	5	10	6	5
“Créditos” in PhD and Master Courses	20	20	22	27,5	25	49,2	28	46

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2007)
Astrophysical Journal Supplement Series	1	7.898
Physical Review Letters	7	6.944
Astrophysical Journal	14	6.405
Astronomy and Astrophysics Review	1	6.000
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	2	5.249
Physical Review D	5	4.696
Macromolecules	4	4.411
Astronomy & Astrophysics	14	4.259
Physics Letters B	4	4.189
Progress in Particle and Nuclear Physics	1	4.101
Organometallics	2	3.833
Optics Letters	1	3.711
Optics Express	1	3.709
Journal of Raman Spectroscopy	3	3.514
CHEMPHYSCHEM	1	3.502
Journal of Physics G – Nuclear and Particle Physics	2	3.485
Physical Chemistry Chemical Physics	1	3.343
Physical Review C	9	3.302
Analytica Chimica Acta	2	3.186
Physical Review B	6	3.172
Nuclear Physics A	3	3.096
Polymer	1	3.065
Journal of Mass Spectrometry	1	3.062
Food Chemistry	2	3.052
Journal of Chemical Physics	5	3.044
Journal of Synchrotron Radiation	1	2.978
Journal of Geophysical Research	1	2.953
Journal of Physical Chemistry A	1	2.918
Physical Review A	1	2.893

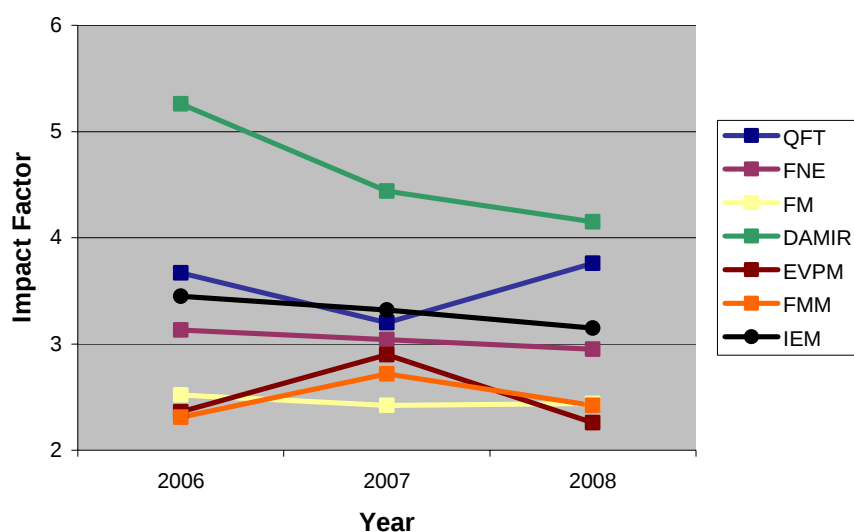
Icarus	1	2.869
Tetrahedron	1	2.869
Classical and Quantum Gravity	5	2.846
Journal of Neural Transmission	1	2.672
Journal of Agricultural and Food Chemistry	1	2.532
Physical Review E	1	2.483
Biopolymers	1	2.389
Journal of Colloid and Interface Science	1	2.309
Food Research International	1	2.271
Journal of Physics D-Applied Physics	2	2.200
Journal of Applied Physics	2	2.171
Journal of Organometallic Chemistry	1	2.168
Journal of Solid State Chemistry	1	2.149
Journal of Analytical and Applied Pyrolysis	1	2.120
Macromolecular Chemistry and Physics	1	2.046
European Physical Journal E	1	2.025
Journal of Applied Meteorology and Climatology	1	1.888
Journal of Physics-Condensed Matter	1	1.886
Computer Physics Communications	2	1.842
Chemical Physics	1	1.805
European Physical Journal A	1	1.801
Vibrational Spectroscopy	3	1.780
Progress in Organic Coatings	1	1.540
Spectrochimica Acta A	2	1.511
Journal of Molecular Structure	1	1.486
Journal of Alloys and Compounds	1	1.455
Applied Surface Science	2	1.406
Optics Communications	2	1.314
Journal of Non-Crystalline Solids	1	1.319
Journal of Molecular Spectroscopy	1	1.269
Journal of Materials Science	1	1.081
IEEE Transactions on Plasma Science	1	1.025
Polymer Bulletin	1	1.022
Journal of Applied Polymer Science	3	1.008
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research: Sect. B	2	0.997
Composite Interfaces	1	0.911
American Journal of Physics	1	0.889
Few-body Systems	1	0.856
Journal of Polymer Research	1	0.842
Astrophysics and Space Science	6	0.834
Journal of Materials Processing Technology	1	0.816
Physica B	2	0.751
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics	3	0.684
Oil and Gas Science and Technology	1	0.653
Condensed Matter Physics	1	0.470
Revista Mexicana de Fisica	1	0.152
Astrophysical Journal Letters	2	-
Journal of Mexican Chemical Society	1	-
Journal of Physical Chemistry C	2	-
TOTAL:	171	Average Impact Factor: 3,15

Number of Journals: 78

7.3 EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO POR DEPARTAMENTOS / EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR BY DEPARTMENTS

Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry: **QFT**
 Nuclear Physics and Statistical Physics: **FNFE**
 Molecular Physics: **FM**
 Molecular and Infrared Astrophysics: **DAMIR**
 Vibrational Spectroscopy and
 Multiphoton Processes: **EVPM**
 Macromolecular Physics: **FMM**



7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón y Cajal”		Other PostDocs		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	3	-	-	-	3	-	2	-	4	1	-	-	12	1	13
FNFE	7	2	-	-	3	1	1	1	10	4	-	1	21	9	30
FM	10	3	-	-	3	-	-	-	1	4	2	1	16	8	24
DAMIR	6	3	-	-	8	1	1	1	5	6	1	1	21	12	33
EVPM	5	1	-	-	-	1	1	1	2	4	-	3	8	10	18
FMM	6	5	-	1	2	-	-	1	2	2	1	-	11	9	20
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5	-	5	5
IEM	37	14	-	1	19	3	5	4	24	21	4	11	89	54	143

¹ “Authorized Stay” excluded

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

**Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados /
 Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 134**

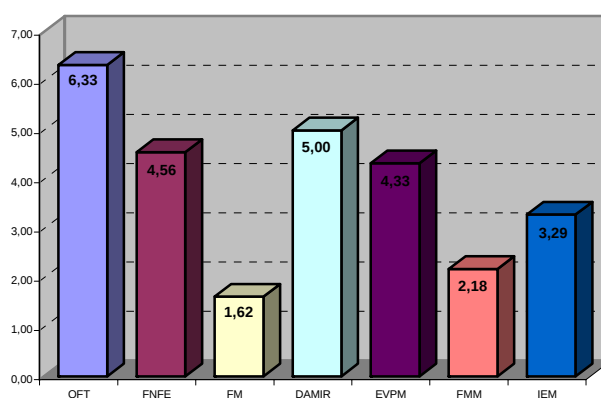
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	FNFE	FM	DAMIR	EVPM	FMM
Publications in en ISI Journals	19	41	16(+5)*	45	21(+5)*	24
Other publications	6	16	8(+2)*	11	1(+2)*	2

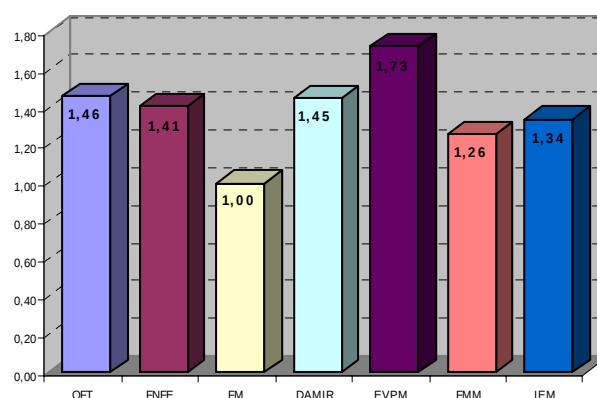
* In parenthesis, papers shared between the FM and EVPM Departments

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS

- **Ratio por investigador senior** (plantilla más “Ramón y Cajal”) /
Ratio per senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”).



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) /
Ratio per scientific personnel (excluding support staff).



(See “Department Key” in section 7.3)

Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal científico en plantilla /
Ratio of ISI publications of IEM per scientific staff researcher: 3.35.

ÍNDICE

INDEX

Introducción / Introduction	1
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	3
Dirección / Direction.....	5
Junta de Instituto / Institute Board	5
Claustro Científico / Scientific Staff.....	5
Departamentos de Investigación / Research Departments	6
Dpto. de Química y Física Teóricas	6
Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	6
Dpto. de Física Molecular	7
Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	8
Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	8
Dpto. de Física Macromolecular	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Management Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	10
2A. Labor Investigadora	13
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	15
2A.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	20
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	25
2A.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	30
2A.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	34
2A.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	40
2B. Research Activities.....	47
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	49
2B.2 Nuclear Physics and Statistical Physics Dept.	53
2B.3 Molecular Physics Dept.	58
2B.4 Molecular and Infrared Astrophysics Dept.	62
2B.5 Vibrational Spectroscopy and Multiphoton Processes Dept.....	66
2B.6 Macromolecular Physics Dept.	72
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	79
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	81
3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	81
3.3 Dpto. de Física Molecular.....	84
3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	86
3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	88
3.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	89
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation.....	93
4.1 Congresos y Reuniones Nacionales / National Congresses and Meetings.....	95
4.1.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	95
4.1.3 Dpto. de Física Molecular	95
4.1.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	95
4.1.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	95
4.1.6 Dpto. de Física Macromolecular	96
4.2 Congresos y Reuniones Internacionales / International Congresses and Meetings.....	96
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	96

4.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	97
4.2.3	Dpto. de Física Molecular	99
4.2.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	102
4.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	103
4.2.6	Dpto. de Física Macromolecular	105
4.3	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	107
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	107
4.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	107
4.3.3	Dpto. de Física Molecular	108
4.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	108
4.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	108
4.3.6	Dpto. de Física Macromolecular	108
4.4	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Conferences.....	109
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	109
4.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	110
4.4.3	Dpto. de Física Molecular	111
4.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	111
4.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	111
4.4.6	Dpto. de Física Macromolecular	112
4.5	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions .	112
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	112
4.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	113
4.5.3	Dpto. de Física Molecular	114
4.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	114
4.5.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	114
4.5.6	Dpto. de Física Macromolecular	115
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	117
5.1	Asignaturas de Doctorado / PhD and Master Courses	119
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	119
5.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	119
5.1.3	Dpto. de Física Molecular	119
5.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	120
5.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	120
5.2	Cursos y Conferencias / Courses and Conferences	120
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	120
5.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	121
5.2.3	Dpto. de Física Molecular	121
5.2.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	121
5.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	122
5.2.6	Dpto. de Física Macromolecular	122
5.3	Cursos, Congresos y Seminarios Organizados por el Instituto / Courses, Congresses, and Seminars Organized by the Institute.....	122
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	122
5.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	123
5.3.3	Dpto. de Física Molecular	123
5.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	124
5.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	124
5.3.6	Dpto. de Física Macromolecular	124
5.4	Premios y Otros Méritos /Awards	124
5.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	124
5.4.3	Dpto. de Física Molecular	125
5.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	125

5.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	126
5.4.6	Dpto. de Física Macromolecular	126
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology.....	127
5.5.3	Dpto. de Física Molecular	127
5.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	127
5.5.6	Dpto. de Física Macromolecular	127
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities.....	128
5.6.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	128
5.6.3	Dpto. de Física Molecular	129
5.6.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	129
5.6.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	129
5.6.6	Dpto. de Física Macromolecular	129
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production	131
6.1	Trabajos Publicados en Revistas JCR-ISI / JCR-ISI Publications	133
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	133
6.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	134
6.1.3	Dpto. de Física Molecular	137
6.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	139
6.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	142
6.1.6	Dpto. de Física Macromolecular	144
6.2	Trabajos Publicados en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications	146
6.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	146
6.2.6	Dpto. de Física Macromolecular	146
6.3	Libros, Monografías y Publicaciones de <i>Proceedings</i> / Books, Proceedings, and Other Publications	147
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	147
6.3.2	Dpto. Física Nuclear y Física Estadística	147
6.3.3	Dpto. de Física Molecular	149
6.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	150
6.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	151
6.3.6	Dpto. de Física Macromolecular	152
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	152
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	152
6.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	152
6.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	152
6.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	152
6.5	Tesinas, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster / Graduate Diplomas and Master Theses	153
6.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	153
6.5.3	Dpto. de Física Molecular	153
6.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	153
6.5.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	154
6.5.6	Dpto. de Física Macromolecular	154
7.	Tablas y Datos / Tables and Data	155
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan.....	157
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals.....	157
7.3	Evolución del índice de impacto por Departamentos / Evolution of the impact factor by Departments	159

7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments	159
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	160
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.	160