

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

MEMORIA
DE LA LABOR REALIZADA DURANTE EL
AÑO 2009

ANNUAL REPORT 2009



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

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, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía Molecular o la Gravitación.

Durante 2009, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de seis Departamentos con Grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Astrofísica, la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y, colateralmente, en moléculas de interés biológico.

En 1976, los científicos en plantilla del Instituto eran sólo cinco. En la actualidad, acoge a cerca de cincuenta investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes 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).

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

La misión del IEM, recogida en su Plan de Actuación para el cuatrienio 2010-2013, es contribuir al avance del conocimiento en las principales líneas de investigación del Instituto, generar sinergias entre los distintos Grupos de Investigación que lo componen, aprovechando su carácter multidisciplinar y sus enfoques teórico/experimental y de ciencia básica y aplicada, y contribuir a la formación de personal científico en las distintas etapas de la carrera investigadora. La visión del IEM es convertirse en un instituto de referencia internacional en la frontera de la investigación científica representada por las líneas de investigación que en él se desarrollan.

La actividad científica realizada durante 2009 ha quedado plasmada en más de 165 publicaciones ISI y la consecución de once tesis doctorales.

INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a modern and ambitious Research Institute deeply entrenched in the CSIC and highly visible not only there but also in Spain, in Europe and in the international community. With a reputation for excellence, this Institute seeks to also be attractive to students, researchers and visitors.

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have been including other areas such as Nuclear Physics, Molecular Spectroscopy and Gravitation.

During 2009, research activities have been organized around six departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Astrophysics, Nuclear Physics, Statistics, Molecular and Macromolecular, Biophysics, Physics of Condensed Matter and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of physics, but with applications in physical chemistry and, collaterally, in molecules of biological interest.

In 1976, scientists at the Institute staff were only five. Currently, IEM hosts about fifty permanent researchers distributed in the following departments:

Theoretical Chemistry and Physics (QFT)
Nuclear Physics and Statistical Physics (FNFE)
Molecular Physics (FM)
Molecular and Infrared Astrophysics (DAMIR)
Vibrational spectroscopy and multiphoton processes (EVPM)
Macromolecular Physics (FMM)

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

The mission of the IEM, as described in its Action Plan for the quadrennium 2010-2013, is, to contribute to the advance of knowledge in key research areas of the Institute, to generate synergies between different research groups that compose it, taking advantage of its multidisciplinary nature together with their theoretical and experimental experience in basic and applied science, and to contribute to the training of scientific personnel in the various stages of the research career. The vision of IEM is to become an international reference institution on the frontier of scientific research represented by the research that it develops.

The scientific activity during 2009 has been shaped over 165 ISI publications and the achievement of eleven doctoral theses.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
STRUCTURE OF THE INSTITUTE

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz (Since 14-9-2009. Dr. Eduardo Garrido Bellido until 13-09-2009).

Vicedirector: Dr. José M. Fernández Sánchez (Since 14-9-2009. Dra. Aurora Nogales Ruiz until 13-09-2009).

Gerente / Manager: D^a. Pilar Criado Escribano

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria: D^a. Pilar Criado Escribano

Vocales:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. M^a José García Borge

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. José González Carmona

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. José Antonio Sánchez Gil

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria: Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Personal Investigador en plantilla:

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. M^a Esperanza Cagiao Escotado

Dra. M^a José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Luis Colina Robledo

Dr. Victor Cruz Cañas

Dr. Luis Mariano Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Concepción Domingo Maroto

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. M^a José García Borge

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
Dra. Belén Maté Naya
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. Rafael Molina Fernández
Prof. Salvador Montero Martín
Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dra. Mirta Rodríguez Pinilla
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Dra. Magna Santos Greve
Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dra. M^a Luisa Senent Diez
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

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Jesús Fernando Barbero González
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. Gonzalo Olmo Alba
Dr. Tomasz Henryk Pawlowski
Dr. Pablo San José Martín

Investigador Científico/ Research Scientist
Investigador Científico/ Research Scientist
Investigador Contratado-JdelaC/ Postdoc Contract-JdelaC
Investigador Contratado I3P/ Postdoc Contract-I3P
Investigador Contratado JAE/ Postdoc Contract-JAE
(since November 2009)

Dr. Luis Garay Elizondo

Doctor Vinculado/ Doctor in Vinculum

Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

Doctor Vinculado/ Doctor in Vinculum

D. David Brizuela Cieza

Becario Predoctoral FPI de CAM/ PhD Fellowship-FPI de
CAM (until September 2009)

D. Daniel Gómez Vergel

Becario Predoctoral I3P/ PhD Fellowship-I3P

Dña. Mercedes Martín Benito

Becario Predoctoral I3P/ PhD Fellowship-I3P

D. Daniel Martín de Blas

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE (since
September 2009)

D. Javier Olmedo Nieto

Becario Predoctoral JAE/ PhD Fellowship-JAE

D. Iñaki Garay Elizondo

Autorización de permanencia/Authorized stay

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
Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dr. Carlos Cabrillo García
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dra. Andrea Jungclauss
Dr. Olof Erik Tengblad
Dr. Ricardo Fernández Perea

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

| | |
|---|--|
| Dr. José Barea Muñoz | Investigador Contratado JAE-Doc/ Postdoc Contract JAE |
| Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández | Investigador Contratado I3P / Postdoc Contract I3P |
| Dr. Armando Relaño Pérez | Investigador Contratado JDC / Postdoc Contract JDC |
| Dra. Manuela Rodríguez Gallardo | Investigador Contratado JAE-Doc /Postdoc Contract JAE |
| Dr. Javier Rodríguez Vignote | Investigador Contratado JDC /Postdoc Contract JDC |
| Dr. Stefan Rombouts | Investigador Contratado “Marie Curie”/ Postdoc Contract “Marie Curie” |
| Dr. Carlos Esebbach Benchimol | Doctor Vinculado / Doctor in Vinculum |
| Prof. Elvira Moya Valgañón (de Guerra) | Doctor Vinculado / Doctor in Vinculum |
| D. Martín Alcorta Moreno | Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P |
| D. Raúl de Diego Martínez | Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P |
| D. Ricardo Domínguez Reyes | Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI |
| Dña. Beatriz Errea Subero | Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI |
| D. Jose Antonio Briz Monago | Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI |
| D. Miguel Madurga Flores | Becario Predoctoral-FPU / PhD Fellowship-FPU (until March 2009) |
| Dña. Carolina Romero Redondo | Becaria Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P |
| D. Mariano Carmona Gallardo | Becario Predoctoral JAE / PhD FellowshipJAE |
| Dña. Esther Vicente Torrico | Becaria Predoctoral JAE / PhD FellowshipJAE |
| D. Mario Alberto Cubero Campos | Becario Predoctoral- CSIC-Costa Rica / PhD Fellowship CSIC-Costa Rica. |
| D. Ángel Perea Martínez | Técnico Especializado G. Medio / Technicien |
| D. Carlos Cruz de la Torre | Titulado Medio contratado CPAN/Tecnician CPAN |
| D. Ibón Bustinduy Uriarte | Autorizado Permanencia / Authorized Stay |
| D. Diego Escrig Forano | Autorizado Permanencia / Authorized Stay |
| D. Victor Modamio Hoybjor | Autorizado Permanencia / Authorized Stay |
| Dña. Jennifer Walker | Autorizado Permanencia / Authorized Stay |
| Personal de apoyo / Support Staff: | |
| Dña. Purificación Corchete Corchete | Ayudante de Investigación / Research Assistant |

DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

| | |
|--|--|
| Dr. José María Fernández Sánchez (Until 17-09-2009) | Investigador Científico / Research Scientist |
| Dr. José Luis Doménech Martínez (Since 17-09-2009) | Investigador Científico / Research Scientist |

Personal Científico / Research Staff:

| | |
|---|---|
| Prof. Dionisio Bermejo Plaza | Profesor de Investigación / Research Professor |
| Prof. Concepción Domingo Maroto | Profesor de Investigación / Research Professor |
| Prof. Rafael Escribano Torres | Profesor de Investigación / Research Professor |
| Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga | Profesor de Investigación / Research Professor |
| Prof. Salvador Montero Martín | Profesor de Investigación / Research Professor |
| Dr. José María Fernández Sánchez | Investigador Científico / Research Scientist |
| Dra. Isabel Tanarro Onrubia | Investigador Científico / Research Scientist |
| Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres | Científico Titular / Tenured Scientist |
| Dra. Belén Maté Naya | Científico Titular / Tenured Scientist |
| Dr. Juan Ortigoso Martínez | Científico Titular / Tenured Scientist |
| Dr Julio Francisco Santos Gómez | Científico Titular / Tenured Scientist |
| Dr. Guzmán Tejeda Gala | Científico Titular / Tenured Scientist |
| Dra. Mirta Rodríguez Pinilla | Investigador Contratado-RyC / Postdoc Contract-R&C |
| Dr. Óscar Gálvez González | Investigador Contratado-JAE / Postdoc Contract-JAE |
| Dr. Ángel Ramos Gallardo | Investigador Contratado-I3P / Postdoc Contract-I3P (until March 2009) |
| Dr. Luis Rubio Lago | Investigador Contratado-JAE UA / Postdoc Contract-JAE UA |
| Dña. Judith Durá Diez | Becario Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA |

D. Juan Hernández Morilla
Dña. María Encina López Arias
Dña. Beatriz Martín Llorente

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

Personal de apoyo / Support Staff:

D. José Manuel Castillo de Pedro

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's / Technical Specialist OPI

Dña. María José Malagón Sisto

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant

D. Miguel Angel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant

D. David Pérez Risco

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant (since October 2009)

DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA / MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Santiago Arribas Mocoroa

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Luis Colina Robledo

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. M^a Luisa Senent Díez

Investigadora Científica / Research Scientist

Dra. Almudena Alonso Herrero

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Ruyman Azzollini

Investigador Contratado / Postdoc Contract (since May 2009)

Dr. Alejandro García Bedregal

Investigador Contratado / Postdoc Contract (until March 2009)

Dr. Antonio Hernán Caballero

Investigador Contratado / Postdoc Contract (since May 2009)

Dra. Natalia Inostroza Pino

Postdoctoral MAE/AECID / Postdoc Contract MAE/AECID

Dr. Álvaro Labiano Ortega

Investigador Contratado / Postdoc Contract (until October 2009)

Dr. Javier Rodríguez Zaurín

Investigador Contratado / Postdoc Contract

Dra. Rosa Domínguez Gómez

Doctor Vinculado / Doctor in Vinculum

Dña. Enrica Bellochi

Becaria Predoctoral-FP7 / PhD Fellowship-FP7

D. Daniel Miralles Caballero

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Miguel Pereira Santaella

Becario Predoctoral-I3P / PhD Fellowship-I3P

D. Javier Piqueras López

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

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

Profesora de Investigación / Research Professor (ad Honorem)

Prof. José V. García Ramos

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Pedro Carmona Hernández

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Luís Díaz Sol

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Magna Santos Greve

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / Doctor in Vinculum

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / Doctor in Vinculum

Dra. Lorena Roldán

Contrato Postdoctoral MAE-AECI / Postdoc Contract MAE-AECI

Dña. Raquel de Llanos Bravo

Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Dña. Elena del Puerto Nevado

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

Dña. Irene Izquierdo Lorenzo

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship- JAE

D. Rogelio Rodríguez Oliveros

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Ramón Paniagua Domínguez
Dña. Adiane García Leis

Becario Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE
Estancia predoctoral CSIC-Cuba / Predoctoral Stay
CSIC-Cuba

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Raquel Ambrona Sánchez
Dña. María Luisa López Gil
D. Eduardo López Tobar

Auxiliar Administrativo / Administration Auxiliary
Ayudante de Investigación/Research Technician
Contratado Técnico-I3P/Technician-I3P

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz
(Until 13-09-2009)
Dra. Aurora Nogales Ruíz
(Since 14-09-2009)

Profesor de Investigación / Research Professor

Científico Titular / Tenured Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Francisco José Baltá Calleja

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

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. María Esperanza Cagiao Escotado

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. María José Capitán Aranda

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Víctor Cruz Cañas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado -I3P / Postdoc Contract-I3P

Dr. Alejandro Sanz Parras

Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE

Dra. Carmen Arribas Arribas

Doctor Vinculado / Doctor in Vinculum

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato

Becario Predoctoral / PhD Fellowship

D. Jon Otegui de la Fuente

Contratado a proyecto / Research Project Contract

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Becario Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Dña. Marianella Hernández Santana

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Dña. Laura Juan Jiménez

Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado / Specialized University
Graduate

D. Rafael Núñez Ramírez

Titulado Superior Especializado / Specialized University
Graduate

Dña. Ana M. Montero Cuellar

Ayudante de Investigación / Research Assistant

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

Dña. Pilar Criado Escribano

Gerente / Manager

Dña. M^a Teresa Burriel Barceló

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's [CFMAC]

Dña. Purificación Díez Rodríguez

Administrativo Cuerpo General Administración Estado

Dña. Ana María García Arribas

Ayudante de Investigación /Research Assistant

Dña. M^a Carmen García Collado

Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado

Dña. Isabel Lombán Botello

Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo

Dña. Concepción Nieto Serrano

Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática

Dña. Rosa Cecilia Sparrow Avila

Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE

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

ALMACÉN

Dña. María Jesús Puado Villalba
Dña. Clara Isabel Cardeñosa García
D. Carlos Jesús Rodríguez Macías

Ayudante de Investigación OPI's / Research Assistant OPI
Administrativo Cuerpo General Administración Estado
C. Ejecutivo Postal de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA

Dña. Pilar Arangüena Pernas
Dña. Flora Granizo Barrena
Dña. Isabel Delgado Oliva
Dña. Margarita Martínez Álvarez

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's /
Técnico de Biblioteca y Documentación
Titulado Técnico OPIS
E. Administrativo de Organismos Autónomos

CENTRALITA

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

Auxiliar Servicios Generales
Auxiliar Servicios Generales

CONSERJERÍA

D. Eduardo Balbas Utrillas
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA

D. Luis Dorado González
D. Carlos Meneses Jiménez
D. Jorge Álvarez Copo

Analista Programador
Técnico Especialista de Grado Medio de OPI's
I3P (Técnico Medio Área Téc. Mant.)

MANTENIMIENTO

Dña. Belén Palero Fernández
D. Fernando Pueyo García
D. José María Sanz Pastor
D. José María Torregrosa Perera

Ayudante de Investigación OPI's
Técnico Especialista Grado Medio OPIS
Oficial de Actividades Técnicas y Profesionales
Técnico de Instalación y Equipación

PROYECTOS Y DELINEACIÓN

D. Andrés de Frutos Gómez
D. José Granados Valenzuela

Titulado Técnico Especializado
Ayudante de Investigación

PUBLICACIONES Y REPROGRAFÍA

D. Julián Gil Risco

Oficial Activ. Técnicas y Profesionales

TALLER MECÁNICO

D. Luis Ángel de Prado Serrano
D. Pedro José Peñaranda Martínez

Ayudante de Investigación
Ayudante de Investigación

TALLER ÓPTICO

D. José Lasvignes Pacheco

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

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos computacionales en Física Gravitacional.
- Análogos de agujeros negros en Materia Condensada.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

COSMOLOGÍA CUÁNTICA DE LAZOS

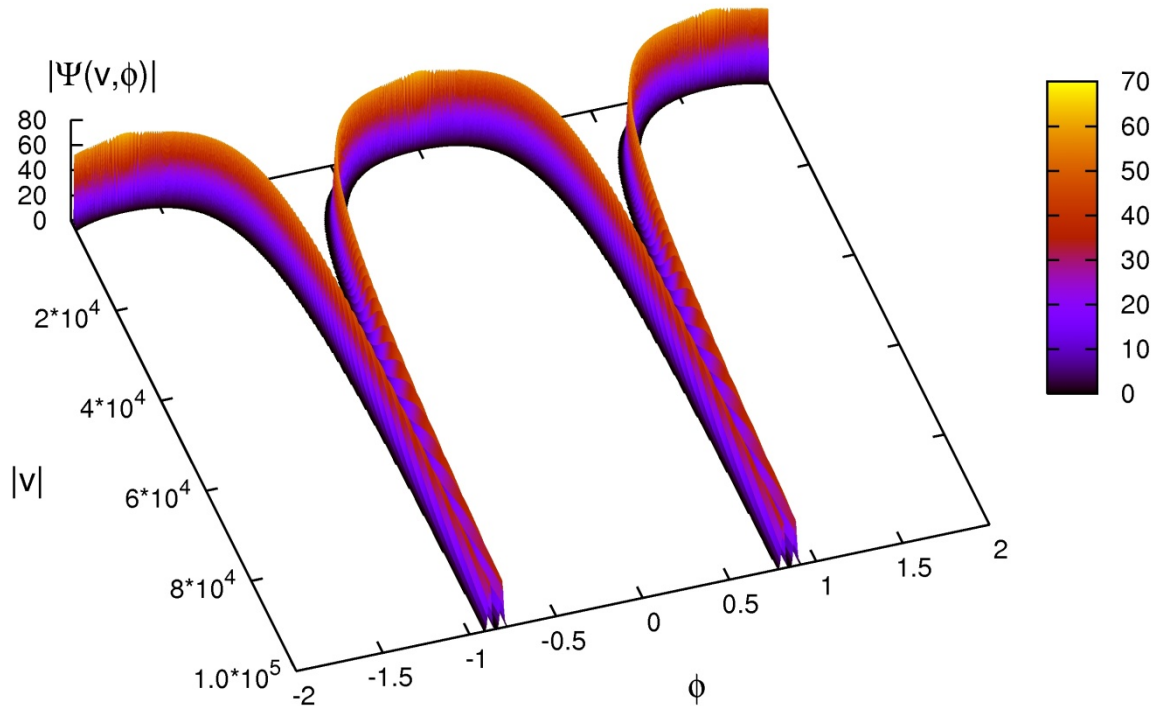
Durante 2009, el Grupo de Física Gravitacional ha continuado su labor investigadora en el campo de la Cosmología Cuántica de Lazos (Loop Quantum Cosmology). La investigación se ha desarrollado en tres direcciones principales: la consolidación de los fundamentos de la Cosmología Cuántica de Lazos, la extensión de los resultados de modelos homogéneos e isótropos a casos anisótropos, y la inclusión de inhomogeneidades para permitir el estudio de perturbaciones cosmológicas.

La Gravedad Cuántica de Lazos (Loop Quantum Gravity) ha surgido en años recientes como un sólido candidato para alcanzar una teoría cuántica no-perturbativa de la Relatividad General. Se trata de una teoría independiente de fondos (backgrounds), basada en una descripción del campo gravitatorio en términos de holonomías y flujos. Para discutir sus implicaciones físicas, se ha prestado mucha atención a la aplicación de las técnicas de cuantización de la Gravedad Cuántica de Lazos en modelos reducidos por simetría que poseen soluciones cosmológicas. Esta línea de investigación es lo que se ha llamado la Cosmología Cuántica de Lazos.

La mayoría de la actividad en este campo se ha centrado en el análisis de modelos simples, homogéneos e isótropos. En particular, el caso del universo plano de Friedmann-Robertson-Walker (homogéneo e isótropo) con un campo escalar es un modelo paradigmático en Cosmología Cuántica de Lazos. A pesar del papel prominente que este modelo ha desempeñado en el desarrollo de esta rama de la física, algunos aspectos de su cuantización requerían de una discusión más detallada. Estos aspectos incluían la resolución cinemática de la singularidad cosmológica de big bang, la identificación de sectores de superselección lo más simples posible, y una comprensión clara del límite Wheeler-DeWitt asociado con la teoría en esos sectores. Nosotros propusimos un operador alternativo para representar la ligadura hamiltoniana que resulta especialmente adecuado para tratar los puntos mencionados de forma satisfactoria. En particular, nuestra ligadura conduce a sectores simples de superselección para el volumen del universo, con soporte contenido en un semieje único de la recta real, y para el que las funciones básicas que contienen la información sobre la geometría poseen propiedades físicas óptimas. A saber: proporcionan una descripción de *no-boundary* (ausencia de contorno) entorno a la singularidad cosmológica y admiten un límite Wheeler-DeWitt bien definido en términos de ondas estacionarias. Ambas propiedades explican la presencia de un rebote (*bounce*) cuántico genérico que reemplaza la singularidad de big-bang a un nivel fundamental, en contraste con estudios previos donde se demostró la existencia del rebote sólo en regímenes concretos y centrándose en estados con un marcado comportamiento semiclásico.

Hemos mostrado también que la dinámica global de un universo homogéneo en Cosmología Cuántica de Lazos puede ser vista como un proceso de *scattering*. Esta imagen puede emplearse para construir un método versátil con el que verificar la conservación de las propiedades semiclásicas de los estados a través del rebote. El método se ha aplicado en detalle a dos ejemplos simples: un universo isótropo de Friedmann-Robertson-Walker, y el sector isótropo de un universo de tipo Bianchi I. En ambos casos, las dispersiones en el logaritmo del volumen y en el logaritmo del momento del campo escalar están relacionadas en el futuro y el pasado distantes. Esto conduce a una estricta conservación del comportamiento semiclásico.

Asimismo, hemos estudiado la auto-adjunción del operador de evolución correspondiente a un universo plano de Friedmann-Robertson-Walker con un campo escalar sin masa y una constante cosmológica positiva, descrito en el marco de la Cosmología Cuántica de Lazos. Se ha mostrado que, si la constante cosmológica es menor que un cierto valor, el operador admite muchas extensiones auto-adjuntas, cada una de ellas con un espectro puramente discreto. Por otra parte, cuando la constante cosmológica es mayor que el menor mencionado, el operador es esencialmente auto-adjunto, aunque el espacio de Hilbert físico no contiene ningún estado físicamente interesante en este caso.



Evolución de la función de onda de un universo plano de Friedmann-Robertson-Walker en presencia de una constante cosmológica positiva, en la que se evidencia la aparición de rebotes cuánticos.

Hemos estudiado también en profundidad el modelo cosmológico anisótropo consistente en un universo de Bianchi I vacío, como un ejemplo para investigar el concepto de evolución física en Cosmología Cuántica de Lazos en ausencia del campo escalar sin masa que se usa frecuentemente como un reloj interno. Para extraer la dinámica del sistema cuando no está presente un reloj adecuado de ese tipo, hemos empleado diferentes construcciones de familias de observables parciales relacionados de manera unitaria. Estos observables están parametrizados, respectivamente, por una de las componentes de la tríada densitizada, o por su momento canónicamente conjugado; cada uno de ellos con su papel de parámetro de evolución. Aprovechando las propiedades del modelo considerado, hemos investigado en detalle los dominios de aplicabilidad de las construcciones introducidas. En ambos casos los observables poseen una interpretación nítida sólo en un sentido aproximado. Sin embargo, mientras que en el primer caso dicha interpretación es razonablemente aceptable tan sólo en una porción de la evolución del universo, en el segundo caso permanece válida durante toda la evolución. Hemos usado estas familias de observables para describir la evolución del universo de Bianchi I. Nuestro análisis confirma la solidez de la predicción de los rebotes, también en ausencia de materia, así como la conservación de las propiedades semiclásicas a través de esos rebotes.

Además, como un paso necesario hacia la extracción de resultados realistas en Cosmología Cuántica de Lazos, hemos analizado las consecuencias físicas de la inclusión de inhomogeneidades. Hemos considerado la cuantización de un modelo gravitacional en vacío que posee grados de libertad local: las cosmologías de Gowdy con polarización lineal y con la topología espacial de un tres-toro. Hemos llevado a cabo una cuantización híbrida que combina técnicas de lazos y de Fock. Esta cuantización resuelve la singularidad cosmológica del big bang, y permite una definición rigurosa de las ligaduras cuánticas, así como la construcción de sus soluciones. Hemos determinado la estructura de Hilbert del espacio de estados físicos y, más aún, hemos recuperado a partir de ella una cuantización de Fock convencional para las inhomogeneidades.

La investigación teórica del grupo se ha visto complementada con trabajos en el frente numérico de la Relatividad General clásica y cuántica. Por ejemplo, hemos creado un paquete de álgebra computacional tensorial llamado *xPert*, para la construcción y manipulación de las ecuaciones de la teoría de perturbaciones métrica, alrededor de fondos (*backgrounds*) arbitrarios. Este paquete está basado en la compenetración de fórmulas combinatorias explícitas para el orden n -ésimo de las perturbaciones de tensores de curvatura y sus cambios gauge, y del uso de técnicas altamente eficientes de canonicalización de índices, proporcionadas por el sistema tensorial subyacente *xAct* (también hecho por uno de nosotros) para Mathematica.

Asimismo, usando herramientas para manipulaciones simbólicas eficientes desarrolladas por nosotros, hemos presentado un formalismo general invariante gauge para estudiar perturbaciones de segundo orden radiativas arbitrarias en un agujero negro de Schwarzschild. En particular, hemos construido las ecuaciones de segundo orden de Zerilli y de Regge-Wheeler bajo la presencia de dos modos de primer orden cualesquiera, hemos reconstruido la métrica perturbada en términos de los escalares *máster*, y hemos calculado la energía irradiada al infinito nulo. Nuestros resultados permiten estudios sistemáticos de perturbaciones genéricas de segundo orden para el espaciotiempo de Schwarzschild. Entre éstos, citamos los estudios de acoplo modo-modo y de los efectos no lineales en la radiación gravitatoria, o de la geometría del horizonte de agujero negro.

En un frente diferente, hemos analizado el proceso de radiación de Hawking debido a configuraciones de colapso gravitatorio en presencia de modificaciones superluminales de las relaciones de dispersión. Con estas relaciones de dispersión superluminales, el horizonte se convierte de manera efectiva en un concepto dependiente de la frecuencia. En particular, a cada momento del colapso, existe una frecuencia crítica por encima de la cual no se experimenta ningún horizonte. Hemos mostrado que, como consecuencia, la radiación a tiempos tardíos sufre modificaciones severas, tanto cuantitativas como cualitativas, en comparación con la descripción estándar de Hawking. Concretamente, el espectro de radiación se vuelve dependiente del tiempo de medida, de la gravedad de superficie asociada a diferentes frecuencias, y de la frecuencia crítica. Aparecen modificaciones importantes incluso si la frecuencia crítica está considerablemente por encima de la escala de Planck.

GRAVEDAD CUÁNTICA

Uno de los problemas más importantes en gravedad cuántica es la identificación de los grados de libertad microscópicos que dan cuenta de la entropía de los agujeros negros. Si fuera posible describirlos de manera inambigua y pudiéramos contarlos, podríamos obtener directamente el valor de la entropía. La relación entre la entropía y el área viene dada por la famosa fórmula de Bekenstein y Hawking que nos dice que la entropía es un cuarto del área del horizonte (en las unidades apropiadas). Las principales teorías candidatas para describir el régimen cuántico de la gravitación -las teorías de cuerdas y la gravedad cuántica de lazos- dan cuenta de esta ley. En el caso de la gravedad cuántica de lazos este resultado ha sido conocido durante más de una década, sin embargo, se ha descubierto recientemente que la entropía de los agujeros negros microscópicos, de acuerdo con la descripción proporcionada por la gravedad cuántica de lazos, presenta un comportamiento inesperado que consiste en una modulación superpuesta al crecimiento lineal de la entropía con el área. Lograr una comprensión detallada de este fenómeno ha sido una de las líneas de investigación principales en las que nuestro grupo ha trabajado durante el año 2009. En este campo hemos desarrollado, en colaboración con científicos de Valencia y Varsovia, una serie de métodos basados en teoría de números y combinatoria que nos han permitido alcanzar una comprensión más profunda de este problema. Entre ellas las más útiles han sido la identificación de un conjunto de ecuaciones diofánticas que simplifican la resolución exacta de los problemas de conteo que se plantean y la introducción de funciones generatrices para la entropía. También hemos encontrado el modo de conectar estos resultados con los métodos estándar que hacen uso de la transformada de Laplace.

Los resultados que hemos obtenido son múltiples. En primer lugar hemos podido demostrar que la modulación observada en la entropía puede estar presente en el régimen macroscópico (aunque el comportamiento asintótico exacto aún no ha sido obtenido). Este resultado es consecuencia de la sutil forma en la que el comportamiento asintótico de la entropía está descrito por la integral (transformada de Laplace inversa) que expresa la entropía en función del área. Concretamente, la acumulación de las partes reales de los polos del integrando al valor que fija el crecimiento lineal de la entropía, es compatible con el comportamiento lineal dado por la ley de Bekenstein-Hawking, pero permite que exista una corrección periódica subdominante que podría explicar la estructura observada en la entropía de los agujeros negros microscópicos.

Hemos aprovechado estos métodos para calcular la entropía de los agujeros negros siguiendo definiciones alternativas a las usuales. En particular, hemos considerado una definición, distinta de la habitual, para el operador de área utilizado en la definición de la entropía. Como es bien sabido, en el caso de los horizontes aislados (en contraste con el caso correspondiente a superficie cerradas arbitrarias), es posible considerar otras definiciones para el área, [aunque hay que decir que la definición estándar, con el espectro habitual no equiespaciado, es la preferida]. Entre ellas hay una elección muy simple y natural que da lugar a un espectro equiespaciado. Esto tiene

algunas consecuencias por lo que se refiere a la definición de la entropía. En una colaboración con Jerzy Lewandowski (Universidad de Varsovia), se han explorado las consecuencias físicas de la adopción de la definición modificada y hemos comprobado que el esperado comportamiento de la entropía está de hecho presente. Una característica notable de este trabajo es el hecho de que hemos sido capaces de obtener expresiones exactas (en forma cerrada) para la entropía y reproducir la ley de Bekenstein-Hawking. Por último, otra aplicación de nuestros métodos ha sido el cálculo de la entropía en el nuevo esquema presentado recientemente por Engle, Noui y Pérez, para definir la entropía de los agujeros negros en gravedad cuántica de lazos mediante una descripción en la que los grados de libertad en el horizonte de un agujero negro vienen dados por una teoría de Chern-Simons para el grupo $SU(2)$.

Durante el año pasado, nuestro grupo ha continuado con su tradicional línea de trabajo sobre la cuantización de los modelos de midisuperespacio -en particular de los universos de Gowdy- tanto dentro de la teoría cuántica de campos habitual como de la gravedad cuántica de lazos. En este sentido, hemos dedicado algunos esfuerzos a desarrollar en detalle los aspectos referidos a la cuantización del oscilador armónico con frecuencia dependiente del tiempo que podrían ser exportados al estudio de los modelos Gowdy. Es importante señalar a este respecto que los modelos de Gowdy pueden ser considerados como teorías de campo descritas por una infinidad de osciladores de ese tipo. Los métodos utilizados en este análisis han sido múltiples y han ampliado considerablemente los desarrollados en trabajos previos. Apoyándonos en estos resultados se ha construido una representación de Schrödinger funcional que ha permitido abordar varios problemas; en particular, la definición de una dinámica unitaria y la existencia de estados semiclásicos.

La labor investigadora en física gravitacional se ha completado con las siguientes contribuciones:

Gravedad Modificada: hemos profundizado en el estudio de teorías de gravedad modificada en el formalismo de Palatini para determinar la habilidad de dichas teorías para generar cosmologías no singulares. Hemos centrado nuestra atención en teorías del tipo $f(R)$ en Universos Friedmann-Robertson-Walker. Hemos encontrado que las condiciones para la existencia de un rebote cosmológico son bastante genéricas, estando determinadas únicamente por la existencia de un cero en la derivada del lagrangiano $f(R)$. De manera notable, hemos obtenido un lagrangiano $f(R)$ que reproduce de manera exacta la dinámica efectiva de LQC con un campo escalar sin masa, lo que demuestra el potencial de estas teorías para capturar ciertos aspectos de la fenomenología de gravedad cuántica y motiva más investigación en esta dirección.

Cosmología inflacionaria: hemos estudiado la generación de perturbaciones primordiales en un universo inflacionario de tipo slow-roll con un campo escalar. En espacio de momentos, las perturbaciones (gaussianas) están caracterizadas por una media nula y una varianza no nula. Sin embargo, de acuerdo con la literatura, la varianza en espacio de posiciones diverge en el ultravioleta. Hemos reconsiderado el cálculo de la varianza en espacio de posiciones usando métodos bien establecidos de renormalización en espacios curvos. Este procedimiento afecta las predicciones referentes a los espectros de potencias escalares y tensoriales para longitudes de onda observables hoy en día. En consecuencia, la huella de la inflación en las anisotropías del fondo de microondas se ve significativamente alterada con respecto a la predicción estándar. En particular, encontramos un cambio no trivial en la relación de consistencia que relaciona el cociente de amplitudes escalar y tensorial con los índices espectrales. La influencia del fondo primordial de ondas gravitatorias en el fondo de microondas puede que sea observable en el futuro próximo, lo que ofrece un test no trivial de nuestras nuevas predicciones.

Agujeros negros: un aspecto molesto de la derivación de Hawking de la radiación de agujeros negros es la necesidad de invocar condiciones extremas para el campo cuántico que origina los cuantos emitidos. Se suele argumentar que la derivación requiere la estricta validez de la teoría de campos relativista hasta escalar de energía arbitrariamente altas (por encima de la escala de Planck). Usando las funciones de correlación del campo de materia, hemos demostrado que esto no es necesariamente así si el problema se plantea de manera covariante. Hemos encontrado que la radiación de Hawking es robusta bajo la introducción de una frecuencia de corte a la escala de Planck.

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL GRAFENO

Durante el año 2009 hemos continuado con la investigación teórica de las propiedades electrónicas del grafeno, es decir, el material hecho de carbono de un solo átomo de espesor y con la coordinación hexagonal típica de las láminas de grafito. Desde su descubrimiento en 2004, la investigación del grafeno ha suscitado un interés creciente en la comunidad de la física de materia condensada, en tanto que el carácter genuinamente bidimensional del material le hace susceptible de tener propiedades no convencionales referidas a su comportamiento elástico, óptico y electrónico. Nuestra investigación se ha centrado en el análisis de las inestabilidades superconductoras del grafeno a alto nivel de dopado, así como en el estudio de los efectos de la curvatura de esta peculiar membrana metálica.

La investigación del estado fundamental del grafeno a alto dopaje se ha emprendido en colaboración con un importante grupo experimental del Lawrence Berkeley National Laboratory. Una de las observaciones fundamentales de este grupo había sido que, bajo condiciones apropiadas de dopado químico, el nivel de Fermi se puede ajustar en torno de una singularidad de Van Hove en la banda de conducción del material de carbono bidimensional. Se sabe que la densidad de estados divergente en este tipo de singularidad puede conducir a diferentes tipos de inestabilidades en el líquido de electrones en dos dimensiones. En nuestro caso, hemos modelado la geometría específica de los puntos de silla extendidos que aparecen en la banda de conducción del grafeno, y que tienden a desarrollar valles alargados con dispersión casi plana siguiendo la frontera de la zona de Brillouin. Este carácter extendido de la singularidad tenía sólo precedente en la observación de la dispersión de ciertos superconductores de alta temperatura crítica. Nuestro análisis teórico ha mostrado de hecho que la superconductividad es una de las inestabilidades electrónicas que pueden aparecer cuando el grafeno está en torno de la singularidad de Van Hove de la banda de conducción. Esta conclusión se ha alcanzado mediante el cálculo del vértice BCS convenientemente vestido en el marco de la "random-phase approximation", y la posterior determinación de los acoplos e-e renormalizados en las diferentes representaciones del grupo de simetría puntual. Cerca de la singularidad de Van Hove, la fuerte modulación de la densidad de estados a lo largo de la línea de Fermi conduce siempre a la existencia de un acoplo negativo, que genera la inestabilidad superconductora a temperatura suficientemente baja. Hemos completado este análisis buscando también una posible inestabilidad magnética en el sistema, que podría surgir como consecuencia de la gran densidad de estados en torno de la singularidad de Van Hove. A tal fin, hemos calculado la susceptibilidad magnética en función de la temperatura para comparar su divergencia con respecto a la intensidad de la inestabilidad superconductora, encontrando que esta última prevalece en todo el rango de valores relevantes de la repulsión de Coulomb y del potencial químico alrededor de la singularidad de Van Hove. En combinación con la contribución experimental de la colaboración, nuestros resultados han permitido así apoyar la idea de que el grafeno altamente dopado puede entrar en una fase donde la superconductividad esté mediada por un mecanismo electrónico, siempre que el dopado alcance el nivel de la singularidad de Van Hove y que la simetría de la red se preserve, es decir, que los átomos dopantes no introduzcan nuevos estados cerca de la singularidad que puedan romper la estructura de bandas original.

Por otra parte, hemos estudiado los efectos de fuerte curvatura en el grafeno, continuando con nuestra investigación de las uniones entre grafeno y nanotubos de carbono. A este respecto, es muy prometedor que estas estructuras híbridas hayan sido ya fabricadas en los laboratorios Fujitsu, mientras que es también concebible que puentes entre dos hojas de grafeno se puedan construir a partir de las conocidas bicapas de grafeno. Nuestro análisis teórico se ha centrado en la geometría de puentes de grafeno en los que un nanotubo de carbono muy corto conecta las dos láminas, introduciendo 12 defectos heptagonales para curvar la red hexagonal de átomos de carbono. Tomando uniones de longitud muy pequeña en comparación con el radio del nanotubo, hemos desarrollado una teoría efectiva de fermiones de Dirac para describir las propiedades electrónicas de baja energía de estas uniones bicapa en el límite del continuo. En esta construcción, hemos incluido de forma apropiada el efecto que los anillos heptagonales inducen en los campos de Dirac representativos de las excitaciones electrónicas de baja energía. Esta acción se ha simulado anclando una línea de flujo magnético ficticio en cada defecto topológico, siguiendo el mismo procedimiento aplicado tiempo atrás en el caso de las redes de fullerenos. Los puentes entre hojas de grafeno representan de hecho una situación que puede considerarse en cierto modo dual al caso de los fullerenos, en tanto que los 12 anillos pentagonales en estas redes cerradas juegan un papel opuesto al de los defectos heptagonales en el puente. Hemos encontrado en particular que, cuando el flujo gauge efectivo de los defectos topológicos se hace máximo, los modos de energía cero de la ecuación de Dirac se agrupan en dos tripletes, que pueden considerarse como la contrapartida de los dos tripletes de modos cero que surgen en el límite continuo de fullerenos esféricos gigantes. Adicionalmente, hemos investigado los espectros de estas uniones bicapa llevando a cabo la diagonalización numérica de hamiltonianos de enlace fuerte en redes muy extensas con la geometría de tales puentes de grafeno. De esta manera, hemos demostrado la correspondencia entre el número de estados electrónicos localizados observados en el cálculo numérico y el flujo gauge efectivo predicho en el límite continuo. Hemos concluido así que los puentes de grafeno pueden ser descritos consistentemente por medio de una teoría efectiva de dos fermiones de Dirac en la correspondiente geometría curva, abriendo así la posibilidad de usar el material real de carbono para experimentar con la interacción entre la curvatura y los campos de Dirac. Es por tanto razonable pensar que el estudio de estos sistemas de materia condensada pueda permitir la investigación de efectos gravitatorios relevantes ligados al carácter de tipo Dirac de las cuasipartículas electrónicas, que de otro modo sólo serían accesibles a energías mucho mayores típicas de los fenómenos astrofísicos.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estructura nuclear estudiado en 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.
- Física Nuclear Básica.
- Estructura nuclear.
- Estructura y reacciones con núcleos estables y exóticos.
- Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones nucleares con sistemas de pocos cuerpos.
- Sistemas fuertemente correlacionados y mesoscópicos.
- Integridad cuántica y modelos exactamente solubles.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- 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.
- Reacciones nucleares directas.
- Estructura nuclear.
- Masas nucleares.
- Transiciones de fase.
- 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.
- Campos medios jerárquicos.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para Fuentes de neutrones.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Coincidencias gamma-gamma, detección de partículas cargadas.
- 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.
- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales
- Teoría de grupos.
- Teoría de muchos cuerpos.
- Métodos de cálculo de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas. Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.

- Soluciones de ecuaciones no lineales acopladas.
- Grupo de renormalización de la matriz densidad y diagonalizaciones de gran escala.
- Dispersión de Neutrones.
- Técnicas calorimétricas.
- Medidas de Adsorción.

LABOR INVESTIGADORA:

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

A lo largo de los años 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 memorias de 2003-2008 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. En paralelo 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 Centro de Micro Análisis de Materiales (CMAM). Realizamos dos tomas de datos en Marzo 2008. La metodología utilizada para separar la contribución de los distintos canales se resume en una publicación técnica (NIM A, 2009). La comparación entre la energía del protón que puebla un estado de ^{12}C y las 3α de su desexcitación permite determinar la presencia de desexcitación electromagnética (γ) intermedia. Esta técnica permite identificar emisiones entre estados no ligados donde la radiación gamma emitida no corresponde a un pico (Phys. Rev. C 2009). El análisis está muy avanzado y constituye el tema de tesis del becario I3P-CSIC, Martín Alcorta.

El estudio de partículas cargadas tras la emisión beta es una fuente de información sobre estados excitados y sus modos de desintegración. En esta 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. Se realizó un experimento en ISOLDE, CERN, en septiembre de 2007 para confirmar nuevos canales de ruptura de estados muy excitados en ^{11}Be que involucran isótopos de helio. El sistema experimental se mejoró permitiendo medir cinco veces más sucesos en coincidencia que en experimentos previos. 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 . El estudio de las correlaciones angulares entre las partículas cargadas emitidas ha permitido 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 2009). También se ha demostrado que el análisis en cinemática completa nos permite determinar con fiabilidad el canal de emisión retardado de tritio (Eur. Phys. J. 2009). Este trabajo constituyó el tema de tesis de nuestro becario FPU, Miguel Madurga, que defendió su tesis en diciembre.

En la misma línea se ha estudiado en ISOLDE (CERN) la desintegración beta de ^{17}Ne . Este es el isótopo más ligero del Neón y presenta emisión de protones y partículas alfa tras la desintegración beta. Los estados intermedios poblados en su desintegración son de gran importancia en el equilibrio estelar tras el proceso CNO. Para la realización del experimento se utilizó el dispositivo experimental Silicon-Ball consistente en una estructura semi-esférica de detectores de Silicio de 15 cm de radio. Con dicho dispositivo se pueden utilizar técnicas de tiempo de vuelo que permitirán distinguir las dos cadenas de desintegración presentes, esto es, la cadena beta-p-alfa y la cadena beta-alfa-p. La relación de intensidades de dichas ramas de desintegración así como la población de los niveles de los diferentes núcleos intermedios (^{17}F , ^{16}O , ^{13}N y ^{12}C) son los principales puntos de interés del experimento. Se utiliza la Matriz R para la caracterización de los estados involucrados en la desintegración. Este trabajo junto con el estudio previo realizado sobre los isótopos ligeros de Argón (NIMA 2009 y Phys. Rev. C aceptado) constituyen el tema de tesis de Ricardo Domínguez Reyes.

La reacción $^4\text{He}(^3\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ es de gran interés astrofísico y una de las principales fuentes de incertidumbre en la determinación de la intensidad del flujo de neutrinos solares que resultan de la desintegración del ^8B proveniente de la reacción $^7\text{Be}(p, \gamma)^8\text{B}$. Además la reacción de interés juega un papel fundamental en la determinación de la abundancia de ^7Li en la naturaleza. La medida de la sección eficaz de dicha reacción, y a partir de ella el factor astrofísico $S_{34}(0)$ constituye por tanto un parámetro de crucial relevancia en los modelos astrofísicos. El experimento realizado en el CMAM a finales de Noviembre de 2008 tiene por objetivo la determinación de las secciones eficaces de reacción para energías de laboratorio del haz incidente comprendidas entre los 2.3 y los 5.3 MeV. El ^7Be formado se depositaba en una placa de cobre situada al final de la cámara. Una vez calculados para

cada energía los números de átomos tanto de $^3\text{He}^+$ y ^4He como de ^7Be podremos determinar la sección eficaz de reacción a las distintas energías estudiadas, así como los correspondientes factores astrofísicos. Por último mediante extrapolación se determinará el valor del factor astrofísico $S_{34}(0)$. El análisis de experimento servirá para la obtención del Diploma de Estudios Avanzados de Mariano Carmona Gallardo.

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 la existencia de un halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad nucleónica (línea de goteo). Un estado de halo es consecuencia de un fenómeno umbral que resulta de la presencia de estados ligados próximos al continuo. La combinación de una energía de enlace pequeña junto con el corto alcance de las fuerzas nucleares permite al nucleón (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 poco ligados 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. Hemos estudiado núcleos con halo de dos neutrones como ^6He , ver memoria 2006, y en 2008 hemos medido ^{11}Li en TRIUMF (Canadá) in de un neutrón como ^{11}Be en REX-ISOLDE (Eur. Phys. J. A, 2009).

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 e intermedios 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 y que la descripción de los canales de ruptura requiere la incorporación del acoplamiento al continuo. El estudio teórico y experimental de la sección eficaz de ruptura fue el tema de tesis de Diego Escrig defendida el pasado mes de septiembre. Nuestro estudiante de tesis Mario Cubero analiza los datos de ^{11}Li en plomo tomados en el laboratorio canadiense TRIUMF (memoria 2008). 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>.

ESTRUCTURA A ALTO MOMENTO ANGULAR EN ISÓTOPOS DEL OSMIO E IRIDIO

En 2009 nuestro estudiante de doctorado Víctor Modamio ha continuado el análisis de datos tomados en un experimento realizado en los LNL Legnaro (Padova, Italia) usando una reacción del tipo fusión incompleta para estudiar la estructura a alto espín en algunos isótopos del Osmio y Iridio. En el núcleo ^{188}Os hemos estudiado por primera vez el cruce de bandas entre la banda del estado fundamental y una banda con $K^\pi=10^+$. Además hemos podido identificar un número de nuevos estados multi-particulares con alta K y estudiar las propiedades de sus desintegraciones para comprobar si K es un buen número cuántico en estos núcleos. Los resultados con respecto al núcleo ^{188}Os ha sido publicado durante este año (Phys. Rev. C 2009). El análisis del resto de los datos de este experimento, en particular sobre los isótopos ^{187}Ir y $^{187,189}\text{Os}$, también ha sido realizado en 2009 y de momento estamos preparando los resultados para su publicación. Víctor Modamio entregará su tesis doctoral en febrero de 2010.

MEDIDAS DE VIDAS MEDIAS Y MOMENTOS MAGNÉTICOS EN ISÓTOPOS DEL ESTAÑO

Las medidas de vidas medias y momentos magnéticos de estados excitados son de alto interés dado que dan información directa sobre las 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 o incluso más corta, hay que aplicar métodos basados en el efecto Doppler y técnicas de campos transitorios, respectivamente, para medir su vida media y su momento magnético. En 2009 hemos sido responsables de una medida de vidas medias y momentos magnéticos en los núcleos $^{122,124}\text{Sn}$ realizado en el UNILAC (GSI, Alemania) y otro experimento en REX-ISOLDE dedicado a la medida de $g(2^+)$ en el núcleo radiactivo ^{138}Xe . Primeros resultados con respecto a las vidas medias de los estados 2^+ en $^{122,124}\text{Sn}$ junto con los resultados de una medida similar en $^{112,114,116}\text{Sn}$ realizado en 2007 ya han sido enviado por su publicación. De momento nuestra estudiante de doctorado Jennifer Walker está analizando datos obtenidos

en este experimento en lo cual cuatro detectores del tipo Cluster (un total de 28 cristales de Ge) han sido usados con la meta de determinar momentos magnéticos en los isótopos estables del Sn.

Con la idea de ampliar las actividades con respecto a las medidas de momentos magnéticos con haces radiactivos hemos preparado una nueva propuesta experimental para estudiar núcleos alrededor de ^{132}Sn a energías relativistas en el GSI y esta propuesta ha sido aprobado en Septiembre de 2009.

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 and Phys. Lett. B 2009) ha sido el tópico del trabajo de tesis de Lucia Caceres 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 las 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 están 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 nuestros experimentos a baja energía, consiste en el diseño y realización de un telescopio ultra fino para la detección y separación en masa de partículas cargadas ligeras, junto con una electrónica multiplexada que nos permite en un modulo VME tratar y analizar los 512 canales del telescopio simultáneamente. Este sistema se ha probado con haces estables de Na, Si y Mg acelerados entre 2 – 30 MeV en el tandem del laboratorio de CMAM. Hemos podido separar y identificar los distintos isótopos y determinar el ángulo de emisión y las energías.

La segunda línea de trabajo enmarcada dentro de la colaboración R3B para la futura instalación de FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), consiste en el construcción y testeo de un centellador compuesta de dos cristales (Phoswich). También, se han realizado simulaciones del comportamiento del mismo Phoswich compuesto por $3\text{cm LaBr}_3(\text{Ce}) + 5\text{cm LaCl}_3(\text{Ce})$. El objetivo ha sido separar e identificar los pulsos de cada cristal individual del Phoswich, lo cual hemos conseguido con éxito.

REACCIONES INDUCIDAS POR NÚCLEOS BORROMEOS

Estudio de reacciones inducidas por núcleos borromeos como ^6He y ^{11}Li , desarrollando la teoría y los programas computacionales adecuados para el cálculo de observables de dispersión tanto elásticos como de ruptura. Previamente, ello requiere el tratamiento adecuado de la estructura de estos núcleos exóticos que se consideran formados por 3 partículas, un core más 2 neutrones de valencia.

CÁLCULOS DE ESTRUCTURA NUCLEAR A BAJA ENERGÍA

En el contexto del modelo de bosones en interacción, hemos abordado el problema en el que los parámetros presentes en el hamiltoniano se determinan cuando la superficie de energía potencial que se obtiene con este modelo se ajusta a la obtenida con métodos de campo medio. Este método para obtener los parámetros es factible pero necesita aún ser mejorado. Este trabajo está aún en desarrollo.

El modelo de bosones en interacción se ha empleado para ver si es capaz de reproducir la simetría de punto crítico $X(5)$, mediante el ajuste de los niveles de energía de excitación que proporciona el modelo $X(5)$. El ajuste ha sido posible y ahora estamos redactando un artículo para su publicación con los resultados obtenidos.

Hemos calculado los elementos de matriz nucleares que aparecen en la semivida por desintegración beta doble sin neutrinos de los isótopos ^{136}Xe , ^{148}Nd y ^{154}Sm , utilizando el modelo de bosones en interacción. También hemos obtenido las probabilidades de ocupación de los niveles de partícula simple en las principales capas nucleares, comparando en algunos casos muy bien con las probabilidades obtenidas de experimentos de transferencia de protones o neutrones.

VIOLACIÓN DE PARIDAD EN DISPERSIÓN DE ELECTRONES POR NÚCLEOS

Los procesos de dispersión de electrones por núcleos han sido en el pasado una excelente herramienta con la que obtener información sobre la estructura nuclear. Gracias a estos procesos existe hoy en día una información detallada sobre las propiedades electromagnéticas de núcleos estables y de sus densidades de carga y se espera que esta información sea ampliable a núcleos inestables en las nuevas instalaciones de GSI (Alemania) y RIKEN (Japón). Por otro lado, el conocimiento sobre las distribuciones de neutrones es todavía muy limitado debido a que su extracción se realiza mediante experimentos con sondas hadrónicas que están sujetas a mayores incertidumbres que las sondas electromagnéticas, ya que el mecanismo de reacción no está bien entendido. En consecuencia, no existen hoy en día medidas de densidades de neutrones o de radios nucleares de neutrones con precisión superior al 1%. Una nueva posibilidad consiste en la determinación de las densidades neutrónicas a través de las asimetrías en experimentos de dispersión elástica de electrones polarizados por núcleos con violación de paridad (PV) que es introducida por la interferencia entre las amplitudes electromagnética y débil. Mediante el análisis de estas reacciones se puede obtener información limpia sobre la distribución espacial de neutrones en el núcleo ya que la interacción electrodébil es perfectamente conocida. Mientras que los experimentos usuales de dispersión de electrones son sensibles a las distribuciones de carga, los experimentos con PV son sensibles a las distribuciones de neutrones. Por tanto, estos experimentos permitirán medir las distribuciones de neutrones con precisión mucho mayor que las obtenidas con hadrones. Tomando como ejemplo el núcleo ^{208}Pb , hemos calculado las asimetrías esperadas mediante modelos de campo medio autoconsistentes.

No obstante, la motivación histórica para el estudio de esos procesos con violación de paridad fue la posibilidad de extraer información sobre la corriente débil neutra y así comprobar la validez del Modelo Standard a baja energía. Esta posibilidad surge porque la asimetría PV adopta una expresión sencilla, independiente del modelo, en términos de constantes del Modelo Standard, cuando ciertas aproximaciones son satisfechas. En particular, una de estas condiciones es que no exista mezcla de isospín en el estado fundamental del núcleo. Por tanto, conocer el efecto de estas mezclas de isospín en las asimetrías es crucial para determinar con precisión esas constantes y los efectos de la extrañeza en las corrientes débiles. Para ello se han estudiado varios núcleos con $N=Z$ y se han evaluado esos efectos.

ESTUDIO DE LA EVOLUCIÓN DE LA FORMA NUCLEAR CON MÉTODOS AUTOCONSISTENTES

La evolución de las formas que el núcleo adopta en su estado fundamental a medida que el número de sus constituyentes cambia es un área de investigación de gran actividad tanto teórica como experimental. Desde el punto de vista teórico el problema se ha enfocado desde muy distintos puntos de vista que abarcan desde modelos geométricos y algebraicos hasta modelos microscópicos basados en modelos de capas o modelos de campo medio autoconsistente. La evolución de las formas nucleares se describe de forma distinta dependiendo del modelo que se trate. Así, en los modelos algebraicos como el Modelo de Bosones Interactuantes (IBM), los cambios de forma son asociados con roturas de simetrías dinámicas y se corresponden con transiciones de fase. En los modelos de capas son debidas a mezcla de configuraciones. En el lenguaje de campo medio los cambios de forma surgen cuando los orbitales deformados de partícula independiente se redistribuyen energéticamente.

Nuestro trabajo se ha centrado en investigar las transiciones de forma mediante modelos microscópicos de campo medio autoconsistente no relativista basados en interacciones efectivas entre los nucleones globalmente ajustadas para reproducir el conjunto de la carta nuclear. En concreto, estudiamos hasta qué punto las suposiciones hechas para los potenciales beta-gamma con los que se determinan las simetrías en los puntos críticos tienen una

justificación microscópica. También hemos estudiado diferentes cadenas isotópicas en las que se ha predicho la existencia de una transición de forma. Hemos estudiado las superficies de energía correspondientes a cálculos triaxiales obtenidas mediante métodos de Hartree-Fock + BCS usando fuerzas de contacto de tipo Skyrme y métodos de Hartree-Fock-Bogoliubov usando fuerzas de rango finito de tipo Gogny. La evolución de formas nucleares se ha estudiado en cadenas de isótopos de Yb, Hf, W, Os y Pt donde hemos identificado regiones axiales proladas y oblatas, así como transiciones entre ellas y zonas de triaxialidad.

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

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 han sido objeto de estudio los procesos de captura radiativa de tres partículas. En concreto, hemos investigado las posibles reacciones en las que participan neutrones y partículas alfa. Estos procesos juegan un papel esencial para poder saltar los “gaps” $A=5$ y $A=8$. Finalmente, hemos obtenido lo que se conoce como relaciones integrales para reacciones que involucran tres partículas, en concreto para reacciones 1+2. Hemos mostrado como el uso de estas relaciones hace que la aproximación adiabática sea una herramienta enormemente útil para extraer de forma precisa la matriz S de un determinado proceso, incluidos reacciones con varios canales abiertos.

MODELOS EXACTAMENTE SOLUBLES

Durante el año 2009 realizamos avances significativos en el estudio, generalización y aplicaciones de los modelos de Richardson- Gaudin (RG) a diversos sistemas cuánticos fuertemente correlacionados.

Estudiamos la realización de modelos de RG en el álgebra $so(6)$ que corresponde a sistemas fermiónicos con grados de libertad intrínsecos de color. Es decir, fermiones con tres componentes intrínsecas. Estos sistemas comienzan a ser investigados en el laboratorio utilizando átomos con tres estado hiperfinos. Si se aproxima la interacción interatómica por una pairing invariante de color, el sistema es integrable y exactamente soluble. Aprovechamos esta propiedad de solubilidad exacta para estudiar fenómenos de polarización en sistemas fermiónicos de tres colores. 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 una nueva fase superfluida sin brechas que surge de la solución exacta. Propusimos también experimentos que pueden detectar estas fases.

Extendimos el modelo de RG para el álgebra $SU(2)$ (dos componentes) al espacio de complejo y analizamos sus Puntos Excepcionales (EP). Un EP está definido como el cruce de dos niveles para un valor complejo de la intensidad de interacción. Estos cruces de niveles o degeneraciones están permitidos en modelos integrables pero prohibidos en sistemas caóticos. La dinámica de estos cruces de niveles en el espacio de parámetros complejos arroja una nueva luz a la interrelación entre caos y regularidad.

CÁLCULOS DE GRAN ESCALA EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIÓN

Los gases ultrafríos de fermiones o bosones confinados en redes ópticas se han convertido en un instrumento muy importante para la investigación de la física de sistemas fuertemente correlacionados. Los parámetros y la dimensionalidad de estos sistemas se pueden ajustar con gran precisión y control. Fermiones con valores altos del espín se pueden estudiar directamente con átomos fríos en más de dos estados hiperfinos. Para las simulaciones de este tipo de sistemas confinados en redes ópticas unidimensionales hemos utilizado cálculos a gran escala mediante el algoritmo del grupo de renormalización de la matriz densidad. Hemos demostrado la presencia de ondas de densidad de gran amplitud. Estas ondas de densidad se estabilizan debido al potencial confinante que atrapa a los átomos en la red óptica y se pueden considerar como una fase cristalina de triones fuertemente ligados. Demostramos que esta fase es incompresible y robusta frente a la anisotropía de las interacciones. También hemos demostrado que debido a su incompresibilidad la fase cristalina aparece de forma genérica en presencia de 1 a trampa. Hemos estudiado también la transición entre un superfluido triónico y el estado cristalino como función de la intensidad de la interacción y como función de la anisotropía de la interacción.

CAMPOS MEDIOS JERÁRQUICOS

Desarrollamos una nueva metodología para tratar problemas de espines fuertemente correlacionados en redes de dos dimensiones. Esta se basa en el reconocimiento de los grados de libertad relevantes del sistema que se tratan en forma exacta y el resto de la interacción se aproxima en campo medio. Así, el reconocimiento adecuado de estos grados de libertad centrales permite revelar propiedades fundamentales del sistema. En este trabajo estudiamos el modelo Heisenberg frustrado J1-J2. Comparando varias posibles recubrimientos de la red cuadrada: dímeros, plaquetas, cruces, etc. mostramos que solo la plaqueta cuadrada reproduce el diagrama de fases conocido. La fase paramagnética intermedia es un cristal de plaquetas singulete y está conectada con la fase de Neel por una transición de fase continua. También estudiamos fluctuaciones sobre el campo medio y demostramos que en la fase paramagnética el estado fundamental y el primero excitado están separados por un gap que se cierra en la fase de Neel.

En un segundo trabajo estudiamos el mecanismo responsable de la emergencia de plateaux de magnetización en el modelo de Shastry-Sutherland. La utilización de campos medios jerárquicos nos llevó a demostrar que cada plateau se estabiliza en un cierto patrón de espín que satisface condiciones de conmensurabilidad derivadas de nuestro formalismo. Nuestros resultados proveen evidencia en favor de una física local robusta que explica la naturaleza de estos plateaux de acuerdo con experimentos de NMR recientes en $SrCu_2(BO_3)_2$.

DECOHERENCIA Y TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS

Durante 2009 continuamos con el estudio de la relación existente entre las transiciones de fase cuánticas en estados excitados y la decoherencia que un entorno crítico induce en un sistema central pequeño. Como modelo de entorno, utilizamos el Hamiltoniano bosónico de Lipkin. Este Hamiltoniano es un ejemplo paradigmático de una clase genérica de sistemas de dos niveles, que puede atravesar dos tipos de transiciones de fase cuánticas en estados excitados: de primer orden y continuas; representa, por lo tanto, una amplia variedad de situaciones físicas. Este trabajo se realizó en colaboración con el grupo dirigido por el profesor J. M. Arias, de la Universidad de Sevilla. Parte de sus resultados forman parte del proyecto de tesis doctoral de D. Pedro Pérez Fernández, de la misma universidad.

Nuestro principal resultado es que un entorno que experimenta una transición de fase continua en algún estado excitado puede destruir completamente la coherencia cuántica del sistema central que interacciona con él. Concretamente, si la transferencia de energía resultante del acoplo entre sistema y entorno es igual a la energía crítica de este último, la decoherencia inducida en el primero es máxima, y los elementos no diagonales de la matriz densidad reducida del sistema decaen rápidamente a cero. Físicamente, esta transición implica que cualquier estado de superposición cuántica del sistema central decae rápidamente a una mezcla clásica de estados, de forma que su carácter cuántico queda destruido. Por otro lado, las transiciones de primer orden no conllevan ninguna consecuencia importante en la física del sistema central.

Estos resultados se obtuvieron estudiando numéricamente sistemas bosónicos grandes, de hasta 10.000 partículas. También se llevó a cabo un análisis teórico, mediante la aproximación de Tamm-Dankoff, que proporcionó una buena descripción semicuantitativa, excepto en la región crítica.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H_2) es el candidato actual más claro para sustituir a los derivados del petróleo como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H_2 presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H_2 a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. A pesar de la gran importancia tecnológica del fenómeno y quizás por esto mismo ya que muchos de los esfuerzos se han desviado hacia planteamientos de “prueba y error”, la naturaleza microscópica de las interacciones del H_2 con este tipo de sistemas dista de estar bien entendida. Durante el 2009 hemos estudiado este aspecto de la adsorción de H_2 en una serie de sistemas principalmente carbonosos utilizando técnicas de medición de adsorción a temperatura constante y en función de esta (en este último caso utilizando una técnica desarrollada dentro de nuestro grupo de investigación) así como varias técnicas de dispersión de neutrones. Hemos podido establecer en este sentido, como en el caso de la nano-estructuración del carbono, los defectos, siempre con una alta presencia en este tipo de estructuras, sólo altera débilmente la energética de la interacción entre el carbono y el H_2 , consiguiéndose las mayores capacidades de adsorción mediante mecanismos de confinamiento extremo dominados por efectos geométricos/topológicos. Es decir, no son las barreras energéticas las que dominan la adsorción eficiente si no las barreras entrópicas, en el sentido de que una molécula de H_2 atrapada siempre tiene la posibilidad de escapar sin remontar una barrera energética alta pero la probabilidad de encontrar el camino que se lo permite es baja. Esto impone límites a las capacidades de adsorción de los materiales carbonosos no dopados. Sin embargo, hemos descubierto también, que estos límites se ven fuertemente alterados al alza cuando el material es capaz de deformarse estructuralmente según se produce el proceso de adsorción.

Probablemente la información microscópica más directa sobre la interacción del H_2 con el sustrato se obtiene sondeando mediante dispersión inelástica de neutrones la alteración de la dinámica rotacional de la molécula, de naturaleza cuántica en el caso del H_2 , debido a la interacción molécula/sustrato. A este respecto, hemos podido realizar por primera vez una medida de carácter fundamental que aún faltaba. Recurriendo a una complicada técnica neutrónica (espín eco en configuración de tres ejes) y trabajando con transferencia de energía fuera de la condición quasielástica habitual en la técnica, conseguimos la resolución suficiente para medir la anchura de línea natural de la rotación de la molécula de H_2 dentro de la fase cristalina.

Otro tipo de nano-estructuras con una gran importancia tecnológica son los cristales de latex, cristales artificiales formados por auto-ensamblado de partículas nanoscópicas de latex artificial. Cristales de buena calidad de este tipo sirven como moldes para la generación de nano-estructuras con un amplio rango de aplicaciones desde la catálisis hasta la opto-electrónica. Durante el 2009 hemos puesto a punto una teoría original numéricamente eficiente para describir la dispersión de radiación (difracción) en este tipo de sistemas, probablemente la técnica más precisa para obtener información estructural interna. Gracias a este desarrollo hemos podido modelar de forma exhaustiva y cuantitativa medidas de difracción (radiación sincrotrón en este caso). Ciñéndonos al modelado de un único tipo de cristal ya hemos podido obtener varias conclusiones. En primer lugar la estructura fcc se ve fuertemente favorecida frente a otras posibles configuraciones energéticamente equivalentes confirmando algunos informes previos. En segundo lugar, las partículas esféricas iniciales se deforman dentro del cristal en grado apreciable. Finalmente resulta esencial tener en cuenta la dependencia radial de la longitud de dispersión dentro de las nano-partículas para un modelado completo de las medidas. Más aún, hemos desarrollado un método para obtener éstas a partir de las medidas de difracción cristalina.

ESTRUCTURA Y DINÁMICA MICROSCÓPICA DE MATERIA CONDENSADA DESORDENADA

La riqueza de estructuras microscópicas de la materia condensada va mucho más allá de las tradicionales fases cristalinas (sólido ordenado), vidrio (sólido desordenado) y líquido (fluido). Sustancias molecularmente sencillas como los alcoholes simples (Metanol, Etanol, Propanol, ...) presentan fases con diferentes tipos de ordenamiento espacio-temporal en diferentes grados de libertad. Probablemente el ejemplo más destacable es el etanol en el que a parte del cristal, vidrio y líquido convencionales puede adoptar una fase de vidrio orientacional con los grados de libertad traslacionales ordenados en un cristal bcc mientras que los orientacionales están en una fase vítrea desordenada. Estos grados orientacionales pueden a su vez se “fundan” a una determinada temperatura y rotar alrededor de los centros de masas moleculares ordenados cristalinamente.

Durante 2009 hemos estudiado como el juego entre los grados de libertad moleculares y los colectivos influyen en las propiedades de transporte midiendo la conductividad térmica del metanol, etanol y 1-propanol en un amplio rango de temperaturas a lo largo de la transición vítrea. De la comparación queda patente que los grados de libertad

orientacionales son los más relevantes en lo que se refiere al comportamiento vítreo así como la fuerte dependencia de la conductividad térmica con los grados de libertad moleculares, es decir con el número de carbonos o si se prefiere con la densidad de puentes de hidrógeno de la fase condensada. Dichos grados de libertad resultan ser eficientes dispersores de fonones acústicos. Por otro lado, si nos ceñimos a las fases cristalinas de estos tres alcoholes, la conductividad se desvía del comportamiento cristalino esperado según se eleva la temperatura. El estudio de la naturaleza de dicha desviación apunta hacia la aparición de fonones cuasi-localizados que empezarían a poblarse térmicamente hacia los 40 K.

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

En los últimos años gran parte de la labor en este aspecto desarrollada por el grupo ha estado centrada en la candidatura española a la fuente de espalación de neutrones europea (ESS-Bilbao). En mayo del 2009 se ha producido un punto de inflexión en este sentido tras alcanzarse un acuerdo informal en Bruselas a favor de la candidatura sueca (Lund) y el subsiguiente acuerdo suscrito entre el MICINN y el correspondiente ministerio sueco. Como consecuencia el consorcio ESS-Bilbao (Administración Central/Gobierno Vasco) ha reorientado sus actividades pasando éstas a estar dirigidas por el Prof. Javier Bermejo. Más concretamente, las actividades en curso están encaminadas a la construcción de una infraestructura local basada en un acelerador de iones ligeros de potencia con objeto de dar servicio a programas de experimentación avanzada no sólo en la producción de haces de neutrones por procesos de fragmentación nuclear (espalación) si no en áreas tan diversas como la Física de Partículas, el estudio de materiales para Fusión Nuclear, la producción de isótopos inestables para estudios en Física Nuclear o las posibles aplicaciones de aceleradores de este tipo en radioterapia oncológica. Tres serían los objetivos principales del centro de aceleradores:

- Servir como un centro de diseño, desarrollo y prototipación de algunas estructuras de aceleración responsables de la ganancia en energía del haz hasta unos 2.5 GeV.
- Nuclear dentro de nuestro sistema de Ciencia-Tecnología-Innovación, un laboratorio especializado en Ciencia y Tecnología de Aceleradores de Potencia, conmensurable con los existentes en los países de nuestro entorno que asumen labores de desarrollo y coordinación de los esfuerzos que estos realizan en Grandes Instalaciones Internacionales.
- Dotar a nuestro entramado industrial de herramientas que le permitan posicionarse con ventaja en áreas que requieren el uso de haces de iones ligeros (semiconductores de potencia, industrial aeroespacial, litografía, materiales ultra-duros).

A parte del centro de aceleradores, ha comenzado también el montaje del instrumento WISH (segunda estación blanco de la instalación ISIS) en el que se participa en varios de sus componentes así como el desarrollo de una actualización del instrumento de PEARL (primera estación blanco de la instalación ISIS) un instrumento especializado en entornos de muestra a presiones extremas.

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.

- Gases cuánticos ultrafríos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, MOLPRO.
- 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 se subdivide en tres apartados que se indican a continuación:

Física molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos

Alrededor de 2006 empezamos una nueva línea dedicada al estudio de sistemas sólidos que pudieran servir de modelo de objetos astrofísicos. Desde esa fecha hemos trabajado sobre mezclas de hielos de agua, dióxido de carbono, metano y metanol, que son algunos de los más abundantes constituyentes de los núcleos de los cometas. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Al haber adquirido un nuevo criostato recientemente, 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 2009.

Hemos preparado mezclas de hielos de CO₂ y metanol en un rango de temperaturas de interés para cometas y otros objetos astrofísicos. Hemos encontrado dos estructuras de CO₂, como en las mezclas con H₂O. Al calentar a 130 K, el CO₂ distorsionado sublima y permanece únicamente el CO₂ normal, que permanece atrapado en el hielo de metanol hasta su temperatura de sublimación, a 150 K. 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 CO₂ con agua y metanol es similar, pero al ser los hielos de metanol mucho menos porosos que los de agua, las moléculas de CO₂ se insertarían preferentemente en éstos últimos en mezclas conteniendo ambas especies. El trabajo con metanol derivó a una nueva investigación por medio de espectroscopía IR y cálculos teóricos con el programa SIESTA, mediante la cual proporcionamos nuevos resultados sobre las fases de metanol sólido, un problema que no puede aun considerarse perfectamente resuelto.

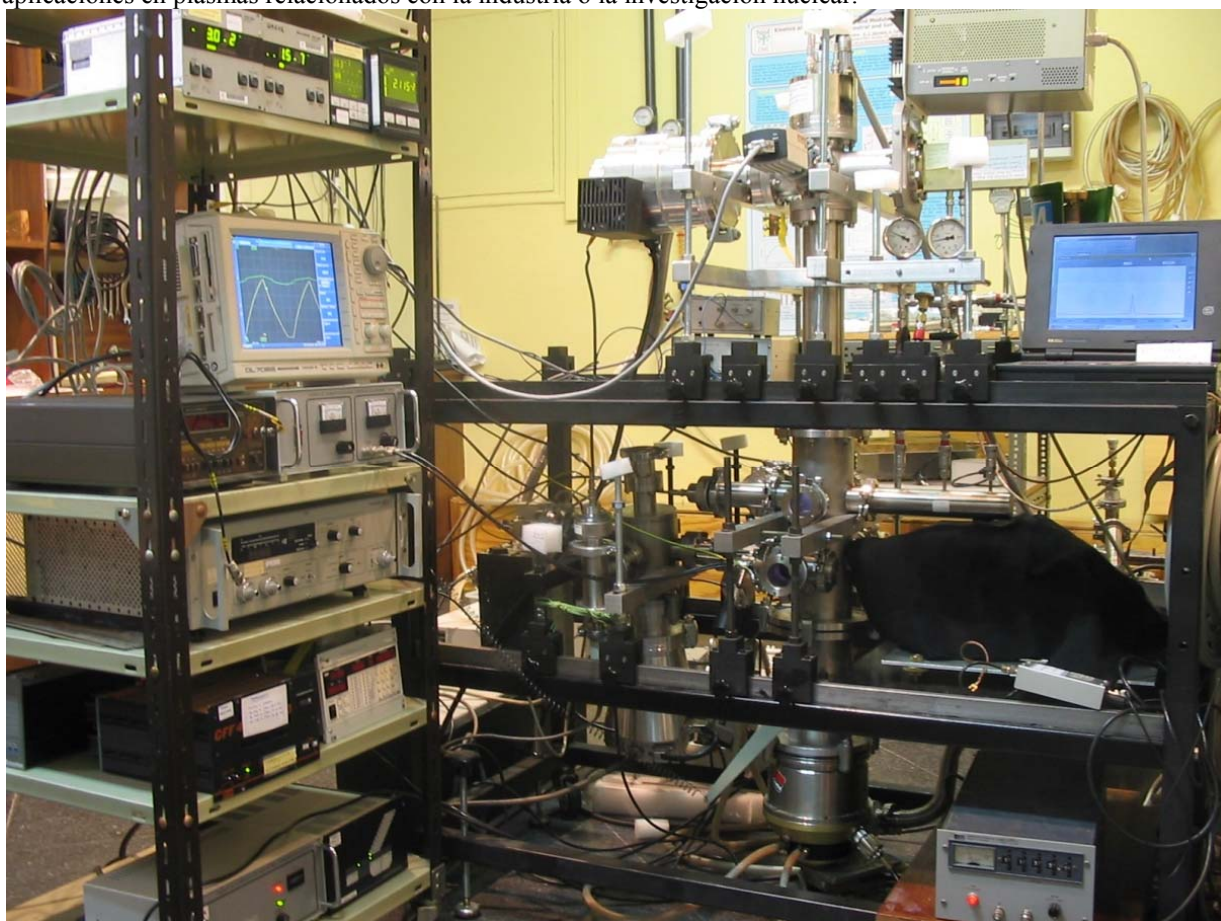
Otro tema de trabajo se ha centrado en hielos de metano y agua, iniciado a partir de observaciones recientes de metano en diversos objetos astrofísicos. Hemos preparado mezclas sólidas de estas moléculas sobre un sustrato frío y estudiado su comportamiento al calentar hasta 60 K. El análisis espectroscópico se ha centrado en las bandas del metano, destacando la presencia de la vibración de “respiración”, prohibida en IR, que indica la existencia de alguna forma de metano distorsionado. Otros efectos espectroscópicos observados se atribuyen a metano adsorbido en microporos de agua o atrapado en el interior de hielo amorfo. Parte de este metano queda retenido después de calentar a 60 K, hasta un máximo de concentración de $\sim 7 \pm 2$ %. Este límite puede resultar de interés en el estudio de las propiedades de temperatura de objetos astrofísicos. Las bandas de los enlaces “colgantes” (dangling bonds) también proporcionan informaciones de interés en estos sistemas.

Quizá nuestro resultado más destacado de 2009 sea el relativo a una banda detectada a 6.85 μm en espectros de estrellas jóvenes, y que suele atribuirse al modo de flexión del ión amonio. Mediante nuestro trabajo sobre soluciones congeladas de cloruro amónico en agua en un rango de temperaturas típico de medios astrofísicos, hemos demostrado que esta banda, muy fuerte en el sólido, queda difuminada en las mezclas, y por tanto las observaciones astrofísicas no pueden asignarse exclusivamente al amonio, como se venía haciendo.

Dentro de la línea de investigación sobre sistemas atmosféricos, hemos llevado a cabo dos estudios teóricos, uno relativo a enlaces de hidrógeno en el dihidrato de ácido nítrico, y otro sobre mezclas ternarias de ácido nítrico, ácido clorhídrico y agua, estimando la estructura y energía de formación de estos agregados. Ambas investigaciones adquieren relevancia en el estudio de nubes estratosféricas polares y la destrucción de ozono estratosférico.

Estos resultados se han publicado en seis artículos en 2009, como se detalle en la parte correspondiente de esta Memoria.

Otra sub-línea de investigación de nuestro grupo está dedicada al estudio de plasmas de baja temperatura de interés atmosférico, conteniendo 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.



Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasmas-superficies

Durante 2009 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 continuado con los estudios de las diferentes distribuciones de energía de los iones generados en descargas de cátodo hueco a baja presión de diferentes gases. En colaboración con el CIEMAT, hemos seguido investigando la eliminación de películas de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) a través de pequeñas rendijas que simulan estructuras “macro-brush” presentes en dispositivos de fusión controlada, de interés para el ITER. En colaboración con el ISOM, hemos estudiado el crecimiento de películas delgadas de nitruros de silicio (SiN) por medio de la técnica de deposición química en fase vapor asistida por plasma. Los principales resultados se reflejan en las publicaciones y contribuciones a congresos indicados más adelante en la presente memoria.

Hemos empezado es estudio de la cinética de plasmas fríos de H_2+Ar . Estos plasmas tienen gran aplicación en diferentes campos de la ciencia de materiales, donde son empleados para procesos de deposición y “sputtering”, o como fuentes de partículas. Asimismo, son ampliamente usados para análisis elemental, en unión con técnicas de espectroscopía de emisión y espectrometría de masas. Hemos estado analizando los resultados experimentales y comparando con un modelo cinético simple, que incluye la presencia de una pequeña proporción de electrones de alta energía y la atenuación de los iones de Ar^+ en la vaina del plasma por intercambio asimétrico de carga.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Hemos extendido nuestros trabajos sobre la relación entre el estado de transición y las propiedades dinámicas al estudio de reacciones ion-molécula empezando por el sistema prototípico $H^+ + H_2$ caracterizada por un profundo pozo en la superficie de energía potencial. Utilizando el formalismo de las probabilidades acumulativas de reacción hemos investigado la estructura del camino de reacción en el que aparecen dos estados de transición, que tienden a la configuración de los reactivos y de los productos. Se ha observado que un tratamiento estadístico es satisfactorio para las colisiones más lentas pero que aparecen restricciones dinámicas a medida que aumenta la energía. 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 molecular”. En este mismo contexto, se han continuado los estudios experimentales sobre el estado de transición en la fotodisociación del CH_3I utilizando la técnica de proyección de imágenes (“imaging”) y con resolución de femtosegundos.

Pueden encontrarse más detalles acerca de esta línea de investigación y los investigadores y personal de apoyo que participan en ella en nuestra página web: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm>

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Esta línea de investigación tiene como objetivo central el estudio de los flujos supersónicos de gases en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos compresibles en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una tierra de nadie plena de contradicciones teóricas y carencias experimentales, con acusado déficit de datos experimentales, de modelos teóricos suficientemente rigurosos, y de métodos de cálculo eficientes.

Las herramientas teóricas de la Fluidodinámica Molecular son la Ecuación de Schrödinger y la Ecuación de Boltzmann generalizada y sus derivados macroscópicos, las ecuaciones de Navier-Stokes y las Gas-Dinámicas. Desde el punto de vista experimental, un terreno, que el Laboratorio de Fluidodinámica Molecular ha demostrado ser extraordinariamente fértil, es el de los medios gaseosos sometidos a expansiones supersónicas (los jets supersónicos). En estos medios es viable el estudio del mecanismo fundamental de la transferencia de energía, las colisiones moleculares, cuya formulación aparece en el núcleo de la ecuación integro-diferencial de Boltzmann generalizada.

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular ha desarrollado a lo largo de los últimos quince años dos instalaciones de diagnóstico de jets supersónicos que son únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad. Una (A) está dedicada al estudio de colisiones cohesivas, y la otra (B), a colisiones inelásticas.

Una preocupación permanente del laboratorio es el mantenimiento y perfeccionamiento de estas instalaciones, sobre la base de las experiencias acumuladas en los procesos de medida y en los experimentos que se van realizando, así como de ciertos desarrollos teóricos. En este sentido, a lo largo de 2009 se ha realizado sobre la instalación (A) el diseño, conjuntamente con la Universidad de Frankfurt, de un ambicioso proyecto para la producción y estudio espectroscópico de filamentos de para-hidrogeno molecular subenfriado por debajo de 2 K, orientado al estudio estructural de la fase líquida del hidrogeno molecular, en particular de su presunta superfluidez. Se han preparado los planos de las diversas partes a construir y/o adaptar a la cámara de expansión (tobera criogénica de pocas micras de diámetro, criostato de helio, sistema de imagen por Schlieren, etc.). Por su parte, la instalación (B) ha sido objeto de mejoras encaminadas a la eliminación de la contaminación térmica de la tobera por efecto de la fuente láser de excitación, así como la incorporación de una bomba seca (tipo scroll) de 25 m^3/h para la adaptación del sistema de vacío al bombeo de oxígeno puro, uno de los gases que forma parte importante de los proyectos de investigación en curso y futuros.

En el apartado de medidas experimentales, solo se ha podido trabajar durante el primer semestre de 2009 por las obras de remodelación del laboratorio. En la instalación (A) se han realizado medidas de expansiones de para- H_2 puro y mezclas con He de composición controlada, a presiones entre 0,6 y 5,5 bar y temperaturas entre 30 y 60 K,

desde toberas de 30 y 50 micras. Se han registrado espectros Raman en las regiones espectrales de rotación (354 cm^{-1}), vibración (4160 cm^{-1}) y vibración-rotación (4497 cm^{-1}), observando nuevas líneas del dímero y trímero, así como la transición progresiva del líquido al sólido, perfectamente caracterizada por el desdoblamiento de la línea rotacional causado por el campo cristalino.

En la instalación (B) se han probado dos nuevas toberas circulares de 90 y 280 micras, respectivamente, la primera de fabricación propia, y la segunda basada en una tobera de aerógrafo. Su comportamiento ha demostrado ser satisfactorio. Con ellas se han medido series de expansiones supersónicas de oxígeno puro con temperatura de estancamiento $T_0=298\text{ K}$ y presiones $p_0=100\text{ mbar}$, 230 mbar , y 10 bar con el fin de iniciar el estudio sistemático de las colisiones inelásticas $\text{O}_2:\text{O}_2$ en el rango de temperaturas por debajo de 50 Kelvin . Con la nueva bomba seca es posible realizar medidas de buena calidad hasta una distancia de unos 33 diámetros de tobera, pero la aparición de la onda de choque por insuficiente capacidad de bombeo limita la obtención de datos a temperatura translacional por debajo de unos 10 Kelvin . En consecuencia, está en estudio la instalación de una segunda bomba scroll, y la posibilidad de incluir una etapa de bombeo diferencial.

En el apartado de interpretación de datos se ha realizado un análisis pormenorizado de las numerosas expansiones de para- H_2 puro obtenidas en la instalación (A) en el rango de temperaturas de tobera 27 a 103 Kelvin que han permitido estudiar las colisiones cohesivas del para- H_2 en el jet entre 20 y 0.2 Kelvin . Este amplio conjunto de datos ha sido la base de para la obtención de los coeficientes cinéticos de formación de dímeros y trímeros con precisión mejorada, y para la primera interpretación cuantitativa del inicio de la nucleación molecular con resolución temporal.

La interpretación de los datos relativos a las colisiones inelásticas $\text{O}_2:\text{O}_2$ obtenidos en la instalación (B) ha proporcionado algunas sorpresas que obligarán a revisar conceptos muy arraigados (pero que se muestran erróneos) en la literatura sobre jets. La principal es que el presunto comportamiento isentrópico de los jets supersónicos dista de ser una buena aproximación, resultando de nuestros datos que el jet es tanto menos isentrópico cuanto más baja sea la presión de estancamiento, y por tanto el número de Reynolds en la fuente. Esto tiene importantes consecuencias para la correcta estimación de la temperatura translacional a lo largo del jet y para la determinación precisa de coeficientes cinéticos nivel-a-nivel en las colisiones inelásticas. Introducidas las correcciones pertinentes, los coeficientes de las colisiones inelásticas del sistema $\text{O}_2:\text{O}_2$ obtenidos vía ab-initio por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones, del Instituto de Física Fundamental del CSIC, han resultado estar en buen acuerdo con el experimento. Esta circunstancia abre un prometedor panorama de cooperación entre teoría y experimento que mejorará la comprensión de los procesos colisionales inelásticos en el régimen de muy bajas temperaturas, y permitirá la validación experimental de los potenciales intermoleculares empleados en los cálculos. Por último, en el capítulo metodológico cabe mencionar el desarrollo de un protocolo de reducción de datos relativos a las variables fluidodinámicas en los jets supersónicos, con su correspondiente tratamiento estadístico, así como la elaboración de diversos programas FORTRAN para el cálculo numérico de dichas variables y su implementación en la Ecuación Maestra de evolución poblacional.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

Se ha concluido la puesta a punto de una nueva técnica para la medida de tasas de transferencia colisional de energía en moléculas en fase gaseosa a baja densidad. Con ella se han determinado las tasas de transferencia colisional entre estados rotacionales del sistema molecular $\text{C}_2\text{H}_2 - \text{C}_2\text{H}_2$ a 155K . La técnica consiste en la preparación de un estado vibracionalmente excitado (en este caso $v_2=1$) en el que mediante un proceso de bombeo Raman estimulado se puebla un solo estado rotacional. A continuación, mediante espectroscopía Raman estimulada se sigue la evolución de las poblaciones rotacionales en $v_2=1$ a través de la evolución del espectro $v_2=2 \leftarrow v_2=1$ en función del tiempo y/o la densidad.

Para seguir esta evolución se ha desarrollado un dispositivo de sincronía variable entre los láseres pulsados de los procesos de bombeo y prueba y un sistema de adquisición de datos que permite determinar precisamente el retardo entre ambos procesos con precisión sub-nanosegundos, a pesar de que el *jitter* (fluctuación a corto término) entre los láseres pulsados implicados en el proceso es del orden de 2 ns . También, con la finalidad de aumentar la resolución temporal de la técnica, se ha desarrollado una célula de Brillouin para comprimir temporalmente uno de los pulsos de bombeo, de 12 ns a 1 ns , con el consiguiente incremento en la resolución temporal.

Es interesante resaltar que esta técnica, a diferencia de otras anteriormente propuestas, permite la normalización de la señal para descontar la influencia en la evolución de las poblaciones debida a la fuga difusiva de la región de observación o a la relajación vibracional, fenómeno que compite con la relajación rotacional.

De este modo se han podido obtener un conjunto de 2750 datos experimentales a retrasos temporales comprendidos entre 6 y 30 ns que han permitido la determinación de 28 constantes de transferencia colisional

entre estados rotacionales sin más aproximaciones que la regla de la suma y el balance detallado, o hasta 55 constantes aplicando leyes de escala. Estos datos abarcan todos los estados rotacionales de orto-acetileno desde $J=1$ hasta $J=21$ donde se encuentra el 99.5% de la población a la temperatura de observación.

El espectro Raman de alta resolución de banda $2\nu_{10}$ de la molécula de C_2H_4 , registrado en Madrid, ha sido analizado en colaboración con la Universidad de Borgoña aplicando el formalismo tensorial para moléculas trompo-asimétricas desarrollado en esta universidad. Así, 191 líneas fueron asignadas y ajustadas sin necesidad de incluir perturbaciones tales como resonancia de Fermi o acoplamiento de Coriolis, con una desviación cuadrática media de $8.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Este formalismo, ya acreditado para el tratamiento de moléculas trompo-esféricas, ha podido así ser probado satisfactoriamente en el caso de moléculas trompo-asimétricas.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y orientación molecular

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. En determinadas circunstancias, algunos de estos paquetes de ondas rotacionales mantienen 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 hemos determinado las condiciones para la creación de estos estados con orientación alta y persistente mediante una modulación adiabática de la intensidad o frecuencia de repetición de los pulsos. Se ha demostrado la posibilidad de utilizar ciertos cruces entre cuasi-energías para invertir adiabáticamente la orientación respecto a la dirección del campo. El método ha demostrado ser aplicable en un rango amplio de moléculas en condiciones accesibles experimentalmente.

Se ha iniciado el estudio de estados cíclicos de más alta energía para los cuales la orientación molecular oscila entre valores máximos y mínimos casi óptimos a múltiplos enteros de la frecuencia de repetición del tren de pulsos. La complicación principal estriba de nuevo en los cruces entre las cuasi-energías del hamiltoniano de Floquet, y los resultados preliminares son favorables.

Se ha realizado un análisis riguroso de los límites de validez de los estados cíclicos aproximados de un Hamiltoniano con potencial periódico en t , mediante los cuasi-estados propios del Hamiltoniano de Floquet cuando H_0 es no acotado y se usa una base truncada en el tiempo. Nuestros resultados proporcionan un método para estimar el carácter cíclico del estado aproximado y demuestran que en condiciones experimentales realistas, el estado es estable durante millones de ciclos de la perturbación.

Se ha trabajado sobre 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. Se ha incluido el estudio explícito del efecto de la interacción dipolar sobre la parte traslacional del Hamiltoniano.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Con la incorporación de una nueva contratada Ramón y Cajal se ha abierto una nueva línea de trabajo en sistemas de gases cuánticos ultrafríos.

Hemos centrado el estudio en un sistema de átomos bosónicos atrapados en una red óptica con un potencial de desorden y en presencia de una fuerza constante oscilante en el tiempo. En el régimen de oscilación rápida hemos demostrado que se pueden hacer transiciones entre las distintas fases cuánticas del sistema. Además estamos analizando la posibilidad de generar momento en el sistema, capaz de desplazar los átomos en la red, con este tipo de potencial.

En colaboración con el Instituto de Ciencias Fotónicas de Barcelona hemos analizado las probabilidades de contar en un detector átomos neutros inicialmente atrapados en una red óptica. El movimiento de partículas en el campo gravitatorio hace que aparezcan correlaciones entre los modos atómicos iniciales al registrarse en el detector. Distintos estados iniciales en la red óptica pueden distinguirse analizando las distribuciones de probabilidad en el detector.

Análisis de Espectros

Se han analizado las formas de línea de espectros Raman Inverso de alta resolución obtenidos en la zona próxima a la tobera de un chorro molecular supersónico de N₂ puro o mezclado con gases nobles. Los espectros más próximos a la tobera mostraban un perfil anómalo, donde cada línea presentaba dos picos asimétricos sobre un pedestal muy ancho. La alta resolución espectral y espacial, junto al alto grado de control sobre el perfil espacial de los láseres empleados ha permitido realizar un estudio detallado de la distribución transversal de densidad, temperatura y velocidad de las moléculas en la expansión. Esto ha permitido refinar ciertos aspectos de los modelos estándar de expansión supersónica.

2A.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- AGNs y Regiones Nucleares de Galaxias.
- Galaxias en Interacción y con Formación Estelar.
- Galaxias a Distancias Cosmológicas.
- Desarrollos Instrumentales.
- Espectroscopía Molecular e Infrarroja.
- Química interestelar, circunestelar y extragaláctica.
- Física Molecular Teórica aplicada a la Astrofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía óptica e infrarroja de Campo Integral.
- Imagen Óptica e Infrarroja.
- Satélites Científicos y Telescopios.
- Física Molecular Teórica.
- Métodos computacionales.
- 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 han llevado a cabo 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 2009 se ha desarrollado el núcleo central del estudio de fase A del instrumento HARMONI para el telescopio europeo 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. En el marco de este proyecto se han desarrollado varios estudios con la empresa SENER, y se ha firmado un convenio con la Universidad de Oxford, en el Reino Unido.

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 2009 el equipo de MIRI en DAMIR ha estado involucrado en las actividades del grupo de pruebas de dicho instrumento, y se

lidera y coordina el grupo “High-z Universe” de la colaboración europea. 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 espectroscopía 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 TRACS.

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. Miguel Pereira Santaella continúa desarrollando 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.

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 han realizado 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, 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 verano de 2010.

Se han publicado los primeros resultados referentes al programa de espectroscopía 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 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 continúa 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 NIRSspec 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 NIRSspec.

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.

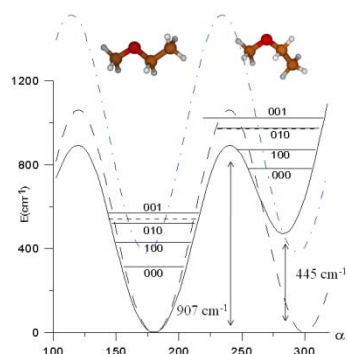
En los últimos años, se han detectado más de 150 especies moleculares distintas, que van desde las moléculas diatómicas más simples, a las más complejas como son los *fulerenos* o los *PAHs*. En esta búsqueda, la Física Molecular Teórica juega un papel fundamental ya que las fuentes astrofísicas representan 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 a nivel 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, Spin-Orbita,..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 H₂ (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 Walls 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 spin, etc.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Físico-Química de los Procesos de Deposición y Ablación.
- Bioespectroscopía.
- Espectroscopía sobre superficies.
- Fotónica de plasmones.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Ablación inducida por Radiación Láser Infrarroja.
- 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.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía infrarroja (Normal y SEIR).
- Espectroscopía Raman (Normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.

- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia Inducida por Láser (LIF).
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía electrónica de transmisión y de barrido.
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica) y Cálculos Numéricos.

LABOR INVESTIGADORA:

ESTUDIO DE LA ABLACIÓN INDUCIDA POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Estamos llevando a cabo estudios de los procesos de ablación en diferentes sistemas:

- Comprimidos de SiO.
- Films de tejidos biológicos (gelatinas).
- Comprimidos de TiO₂.
-

En colaboración con el grupo de Química Láser del Instituto de Química-Física Rocasolano hemos continuado con el estudio de la ablación de blancos de SiO, tema en el que venimos colaborando desde hace ya varios años. En esta ocasión hemos estudiado, mediante Fluorescencia Inducida por Láser (LIF), los procesos de formación y estabilidad de agregados neutros e ionizados de SiO formados a partir de la ablación de blancos de óxido de silicio mediante un láser a 266 nm.

Otro tema en el que colaboramos con el mismo grupo es en el estudio de ablación de tejidos biológicos (gelatinas) mediante radiación láser IR en comparación con el proceso inducido por láser de exímeros a 266 y 355 nm. Se han determinado los umbrales de ablación inducida mediante el láser de CO₂ en muestras de Gelatina B225, Quitosano y Quitosano + PVP, obteniendo que este umbral es sensiblemente más bajo para las muestras de Quitosano que para las de Gelatina y Quitosano + PVP. Desde el punto de vista de los cambios morfológicos inducidos por la irradiación infrarroja se ha comprobado que mientras en la Gelatina B225 predomina la formación de burbujas de diferentes tamaños en el Quitosano predomina la formación de estructuras rizadas con un alto grado de ordenación.

Por último, colaboramos también con el mismo grupo en el estudio de los procesos de ablación mediante láser de CO₂ en comprimidos de TiO₂ en fase de Anatasa o Rutilo. Mediante espectroscopia Raman hemos comprobado que la Anatasa irradiada con láser de CO₂ se transforma en Rutilo para fluencias superiores a 5 J/cm². En el caso del Rutilo la irradiación a fluencias elevadas produce un ensanchamiento y desplazamiento de las bandas Raman comparable al observado en las muestras tratadas térmicamente.

ESPECTROSCOPIA DE PLASMA INDUCIDO POR LÁSER (Laser Induced Breakdown spectroscopy, LIBS).

Hemos continuado la colaboración con el Prof. J.J. Camacho del Departamento de Físico-química de la Universidad Autónoma de Madrid con la puesta a punto de los dispositivos experimentales para poder llevar a cabo estudios de la dinámica temporal de los procesos de LIBS. Ello nos ha permitido llevar a cabo estudios, mediante Espectroscopia de Emisión Óptica (OES) resuelta en el tiempo, de las especies neutras e ionizadas que se producen en los procesos de LIBS del Nitrógeno, Oxígeno, CO₂ y aire, en lo que se refiere a la fase gaseosa y de las especies neutras e ionizadas producidas en la ablación de blancos de grafito y en láminas de Ge. Los resultados muestran, en general, que las especies ionizadas decaen más rápidamente que las neutras, habiéndose obtenido en todos los casos las velocidades y distribuciones de energías de las diferentes especies. También, cuando ha sido posible, se ha hecho una estimación de la constante de recombinación a tres cuerpos a partir de la evolución temporal de la densidad electrónica determinada.

Por otra parte, hemos realizado una revisión de todos los resultados obtenidos hasta ahora en Espectroscopia de Plasma inducido por Láser para su publicación en dos libros generales de Aplicaciones de Láseres y Espectroscopia. Así, hemos publicado los capítulos: “Optical Breakdowns in Gases Induced by High-Power IR CO₂ Laser Pulses” en “Laser Beams: Theory, Properties and Applications” (Capítulo 13, 86 pp) y “Spectroscopic Analysis of Chemical Species in Carbon Plasmas Induced by High-Power IR CO₂ Laser” en “Applied Physics in the 21st Century” (Capítulo 2, 50 pp).

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN DE CORRELACIÓN BIDIMENSIONAL

Dentro de esta sublínea de investigación se ha utilizado la espectroscopia infrarroja y microscopía electrónica para el estudio estructural de partículas nucleocápsidas virales constituidas por la core proteína HCVc-120 y el lazo IIIId del genoma del virus HCV con la secuencia 5'-UAGCCGAGUAGUGUUGGGUCGCGAAAGGCUU-3'. Las

reacciones de ensamble se han realizado a 4°C sobre cristales de ZnSe para espectroscopía infrarroja con el fin de obtener películas de partículas nucleocápsidas y medir sus espectros de intercambio isotópico H/D para subsiguiente análisis por espectroscopía de correlación bidimensional. Tomando como referencia los dos componentes macromoleculares de las partículas nucleocápsidas, los cambios estructurales más relevantes tras la formación de estas partículas se pueden describir como sigue. a) La proteína HCVc-120 sufre un enriquecimiento en estructura β e interacciona con el RNA viral fundamentalmente a través de enlaces arginina-fosfato y arginina-guanina; y b) las partículas nucleocápsidas son permeables al disolvente como demuestra la cinética de intercambio isotópico. Las interacciones arginina-guanina se han demostrado asimismo por espectroscopía ultravioleta utilizando reacciones de ensamble entre la proteína HCVc-120 y diversos oligonucleótidos sintéticos modelo.

ESTRUCTURA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS EN ALIMENTOS

En colaboración con el Instituto del Frío (CSIC) se ha realizado un estudio sobre aplicaciones de la espectroscopía FTIR para determinar la estructuras de lípidos y proteínas y sus posibles interacciones en la formación de diversas emulsiones de aceite en agua. Se prepararon dos emulsiones usando caseinato sódico como sistema estabilizante, con y sin transglutaminasa microbiana (MTG), denominadas respectivamente E/SC y E/SC+MTG. Se evaluaron también la composición, propiedades enlazantes del aceite y agua y las características texturales de las emulsiones. Se usaron valores de fuerza de penetración y del gel para distinguir diferentes ($P < 0,05$) conductas texturales dependiendo de la formulación del sistema emulsionante. La emulsión E/ES+MTG presentó conducta textural de gel mientras que la E/SC carecía de esta propiedad. Los resultados espectrales mostraron desplazamiento hacia mayores frecuencias de la banda amida I al pasar de sistemas estabilizantes proteicos aislados (disoluciones usadas como referencia) a sus correspondientes emulsiones, lo que es atribuible a un mayor orden estructural proteico tras la formación de la emulsión respectiva. La acción enzimática de MTG en el sistema estabilizante de caseinato sódico induce mayores cambios estructurales en términos de desorden de cadenas lipídicas e interacciones lípido-proteína y modificaciones en la estructura secundaria, lo que puede reflejar la formación de una estructura de gel en la emulsión. Estos resultados podrían ayudar a elegir el sistema estabilizante que sea más adecuado y eficaz para su uso en la formulación de productos alimenticios.

PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS

Una de las investigaciones básicas de nuestro grupo durante este año ha sido la preparación de superficies nanoestructuradas metálicas dotadas de altas prestaciones 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, y la modificación de electrodos metálicos. La fotorreducción inducida por radiolisis 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, fundamentalmente flavonoides y antraquinonas, sobre tejidos naturales como la seda y la lana.

Otra línea de interés en este apartado ha sido la fabricación de sistemas metálicos mixtos core/shell. Los métodos ensayados han consistido en la fabricación de sistemas Ag/Au y Pt/Au por reducción de Ag y Pt sobre nanopartículas de Au. 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. En este sentido se ha abierto otra línea de investigación consistente en la fabricación de nanopartículas magnéticas recubiertas de Ag y Au, dando lugar a sistemas core/shell, en donde las propiedades plasmónicas de los metales empleados para la cubierta (*shell*) se combinan con las magnéticas del núcleo de magnetita (*core*).

Por otra parte, se ha puesto a punto una técnica para la fabricación de nanopartículas con formas especiales que permiten una mayor intensificación del campo electromagnético, como nanovarillas y nanoprismas. Las nanopartículas resultantes presenta 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 y de oro 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. Para llevar a cabo esta tarea se han empleado como moléculas bifuncionales diaminas alifáticas y aromáticas.

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. 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. Este trabajo constituyó la Tesis Doctoral del Dr. Luca Guerrini, que fue leída con éxito en marzo de 2009, mereciendo un Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid. Durante este año se han empleado calixarenos y ciclodextrinas funcionalizados con el grupo diticarbamato (DTC) que han permitido aumentar la eficacia en la funcionalización, con lo que se han obtenido sistemas metal/ensamblador con altas prestaciones en la detección de contaminantes y fármacos. 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 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 detección de contaminantes con estructura no aromática que no podían ser analizados con calixarenos y viológenos.

La funcionalización de electrodos metálicos se está llevando a cabo mediante el uso de viológenos y sustancias húmicas gracias al trabajo desarrollado por la Dra. Lorena Roldán, en estancia postdoctoral en nuestro laboratorio. Se ha llevado a cabo el estudio de la 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.

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, y con el Prof. C. Fagnano de la Universidad de Bologna (Italia), consistente en el estudio de la adsorción de péptidos con secuencia específica sobre NP de Ag, que ya empieza a dar sus frutos. Durante este año se ha comenzado el estudio de la adsorción de péptidos de secuencia determinadas y con características de polaridad e hidrofobicidad diferentes con el fin de evaluar las afinidades con las superficies metálicas. El estudio de la interacción con superficies también se ha realizado con fármacos anti-inflamatorios no esteroideos que presentan además actividad antitumoral, como el piroxicam.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS (SEF)

Durante este último año se ha desarrollado plenamente la línea de investigación basada en la técnica SEF (*Surface-enhanced Fluorescence*) con la obtención de espectros SEF sobre nanopartículas en suspensión a cargo de la doctoranda Raquel de Llanos. Este método ha permitido el estudio de la adsorción y agregación de fármacos, especialmente el fármaco antitumoral emodina, y el fármaco anti-inflamatorio piroxicam sobre nanopartículas metálicas. 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 transportadores de suero sanguíneo como LDL (Low-Density Lipoprotein). Este estudio se está realizando en colaboración con el Departamento de Biofísica de la Universidad P.J. Safarik de Kosice (Eslovaquia), lo que ha permitido obtener una valiosa información sobre el mecanismo biológico de la acción antitumoral fotoactiva del fármaco hipericina. Como resultado de una

colaboración con el Instituto de Física Experimental de la Academia de Ciencias Eslovaca se está estudiando los espectros SERS y SEF del biomarcador tioflavina, usado en la detección del péptido β -amiloide, responsable de enfermedades degenerativas relacionadas con el envejecimiento, como la enfermedad de Alzheimer.

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

Se ha avanzado notablemente en la línea de investigación 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). Dentro de esta línea se han obtenido los primeros espectros SERS de algunas de estas sustancias a bajas concentraciones. En particular, se trata concretamente de los β -agonistas clenbuterol, salbutamol y terbutalina, así como de aminoglutetimida, inhibidor de aromataza empleado en deportistas para evitar la pérdida de masa muscular. Éstos se han llegado a detectar a concentraciones de unos cientos ppb, lo que supone mejorar los límites de detección de técnicas empleadas en el análisis rutinario de estos compuestos. Previamente, se llevó a cabo una caracterización vibracional de estas moléculas, usando métodos espectroscópicos convencionales experimentales así como cálculos teóricos de las mismas. También se han ensayado experimentos de funcionalización en nanopartículas metálicas para proceder a la detección selectiva de estas sustancias.

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 espectroscopía 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. 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. Durante este año se han publicado varios trabajos en colaboración con la Dra. Armida Torreggiani del ISOF-CNR en Bologna (Italia) consistente en un estudio pormenorizado de la aplicación de la técnica Raman y la cromatografía HPLC al estudio de la degradación del flavonoide quercetina y de la interacción con proteínas transportadoras en sangre. Asimismo, se ha continuado con la aplicación del método de fabricación de nanopartículas de Ag mediante fotorreducción in-situ para el estudio y detección de pigmentos orgánicos en fibras naturales sin necesidad de extracción. En este caso se ha extendido este método al análisis de pigmentos rojos de naturaleza antraquinónica, como alizarina y carmín. 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. El trabajo realizado en relación a los pigmentos naturales amarillos flavonoides constituyó la base de la Tesis Doctoral de la Dra. Zuzana Jurasekova, que fue defendida en la UNED en Septiembre de este año.

La línea de investigación basada en la aplicación de espectroscopías SERS, SEIRA y SEF al estudio de pigmentos orgánicos sintéticos, que está a cargo de la doctoranda Elena del Puerto ha dado ya sus frutos con la obtención de los primeros espectros SERS de sustancias de difícil estudio. En particular, se trata de quinacridona y sus derivados, pigmentos de gran insolubilidad en medio acuoso, para los que se han ensayado métodos para su dispersión basados en su encapsulación con calixarenos. Así se han obtenido 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 gracias a la reciente incorporación en nuestro grupo de la Dra. Sagrario Martínez Ramírez procedente del instituto 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. Dentro de este campo se está iniciando una nueva línea de investigación consistente en el análisis de aditivos moleculares orgánicos a los morteros para mejorar sus prestaciones.

INTENSIFICACIÓN DE LA FLUORESCENCIA POR NANOANTENAS

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 colaboración con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de *FOM-Institute AMOLF (Amsterdam)* y *Philips Research Labs (Eindhoven)*. En particular, se han caracterizado procesos de emisión óptica cerca de dímeros de nanopartículas rectangulares con resonancias plasmónicas, con especial énfasis en la dependencia con la posición y polarización del dipolo de transición (asociado a la molécula aislada) de la intensificación de la fluorescencia a distancias nanométricas de dichas nanoantenas. Para ello, se han calculado los espectros de *scattering* de los nanodímeros 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 nanodímeros. Se demuestra que el acoplo es muy selectivo, debido a la peculiar distribución de la densidad local de estados electromagnéticos de la nanoantena, dando lugar a enormes intensificaciones (sin *quenching* disipativo), pero también a *quenching* no disipativos. Además, los patrones angulares de emisión resultan gobernados por la resonancia del dímero más que por el patrón dipolar de la propia molécula fluorescente, lo que viene a confirmar el fuerte acoplo entre ambos.

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.
- Microscopía electrónica tridimensional: Estudio estructural de macromoléculas biológicas.
- Biofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido.
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).

- Espectroscopía Raman.
- Micro- y nano-dureza.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y dispersor de luz multiángulo (MALLS) a alta temperatura.
- Dispersión dinámica de luz laser (DLS).

LABOR INVESTIGADORA

SIMULACIÓN DE RECEPTORES DE CANNABINOIDES CB1 Y CB2

Se han realizado simulaciones de dinámica molecular de varias decenas de nanosegundos sobre sistemas compuestos por el receptor de cannabinoides embebido en el seno de una bicapa lipídica. Los receptores de cannabinoides son proteínas transmembrana cuya función se desarrolla en el seno de la biomembrana y por ello es necesario tener en cuenta el efecto mutuo que proteína y bicapa lipídica, como modelo precursor de la biomembrana real, que tendrán ambos componentes. Las simulaciones realizadas con ambos receptores CB1 y CB2 muestran un comportamiento diferenciado cuando se encuentran asociados a una bicapa lipídica. De hecho, los resultados obtenidos confirman que CB1 y CB2 ejercen un grado de distorsión diferente sobre la bicapa lipídica y están de acuerdo con las observaciones experimentales que localizan dichas proteínas en entornos lipídicos distintos.

ESTUDIO ESTRUCTURAL Y ANÁLISIS CONFORMACIONAL DE UNIDADES PROTEICAS

El proceso de plegamiento de proteínas es uno de los eventos más importantes en biofísica. Plegamiento de proteínas ("protein folding") es el término empleado para describir el proceso complejo en el cual las cadenas polipeptídicas adquieren su configuración tridimensional nativa. En último término la estructura de la proteína viene determinada por la naturaleza de cada aminoácido y su posición en la secuencia de aminoácidos que componen la proteína. En este sentido, el estudio del espacio conformacional asociado a cada aminoácido y de la cinética/mecanismos de conversión entre los estados conformacionales más estables proporcionará información valiosísima para arrojar luz sobre el proceso de plegado de proteínas. Una forma de abordar el estudio conformacional es mediante el cálculo de mapas de energía libre asociados a los dos ángulos de torsión ϕ y ψ de la cadena peptídica. Estos mapas se pueden generar mediante simulación de Dinámica Molecular (MD) sobre las subunidades más elementales de la estructura proteica tales como di y tripéptidos. La construcción de estos mapas requiere la realización de numerosas simulaciones y por ello se están empleando tecnologías de computación distribuida que actualmente se están implementando en el CSIC. Así por ejemplo, el grupo GEMPPPO ha puesto en marcha la iniciativa denominada Neurosim (www.ibercivis.es) dentro del proyecto de Plataforma de Computación Ciudadana denominada Ipercivis, en el cual se viene trabajando desde hace un año.

NUEVOS CATALIZADORES BASADOS EN Ni PARA LA COPOLIMERIZACIÓN DE OLEFINAS Y METACRILATO

El grupo del profesor Cámpora del Instituto de Investigaciones Químicas del CSIC en Sevilla ha sintetizado una serie de derivados 2-iminopiridina-N-óxido (PymNox) de Ni como alternativa a los sistemas neutros basados en salicilaldiminato para la síntesis de copolímeros de etileno y metacrilato. Los catalizadores PymNox presentan ventajas al resultar especies activas catiónicas, más reactivas y estables. Inicialmente, los resultados experimentales de copolimerización no eran concluyentes respecto de la idoneidad de estos catalizadores en la incorporación de metacrilato. En particular, el complejo aldimino PymNox no incorpora comonomero, mientras que si lo hace el derivado acetaldimina. Cálculos realizados en nuestro grupo de investigación sobre perfiles de reactividad de ambos catalizadores, confirman estas observaciones experimentales. El complejo acetaldimino presenta una distorsión en el entorno de coordinación del átomo metálico producida por congestión estérica entre los sustituyentes metilo y arilo de la iminopiridina. Dicha distorsión favorece la complejación π del monómero metilmetacrilato y su posterior inserción en la cadena polimérica sobre la complejación σ -O que envenenaría el catalizador. En el complejo aldimino, la complejación σ -O está favorecida y por tanto no se incorpora el monómero en este tipo de catalizadores. Estos resultados teóricos animaron al grupo experimental a repetir los

ensayos de copolimerización y confirmar las observaciones iniciales que, en principio, no habían sido concluyentes.

SIMULACIÓN MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR DE LOS PROCESOS DE PLEGAMIENTO EN ALCANOS DE CADENA LARGA

Se están realizando simulaciones MD en el colectivo estadístico NPT con una caja de simulación conteniendo 500 cadenas lineales de 246 carbonos. Este sistema es representativo de los llamados alcanos de cadena larga que son capaces de plegarse cuando la temperatura disminuye. Además, este sistema es apropiado para poder validar las simulaciones, ya que existen resultados experimentales tanto en el estado fundido como en disolución diluida. El esquema que se ha seguido se resume en las siguientes líneas. En primer lugar, se equilibra el sistema a alta temperatura (600K) durante 4ns, después se reduce esta temperatura en 25K en pasos de 4ns de duración hasta alcanzar la temperatura de 450K. En nuestros estudios se han usado tres potenciales diferentes. Entre ellos están el potencial PYS, que se puede considerar un potencial realista, el potencial de Muthukumar, que introduce de forma ficticia rigidez en el sistema para acelerar el proceso de plegado, y finalmente el potencial de Gee, que es un potencial que introduce rigidez pero no de una forma tan ficticia como el de Muthukumar. Las simulaciones se han realizado en diferentes supercomputadores (Magerit en CESVIMA-UPM y FINISTERRAE en CESGA) usando 64 procesadores en cada simulación. Después de analizar los resultados se observa que el potencial de Muthukumar es demasiado rígido y no se usará en los siguientes cálculos. Sin embargo, el potencial de Gee, acelera el proceso de plegamiento de una forma menos artificial. En el caso del potencial PYS no se observa ningún tipo de ordenamiento en las cadenas en el tiempo de simulación, así que se necesitan dinámicas más largas. Sin embargo, para el caso del potencial de Muthukumar, se puede apreciar un ordenamiento de las cadenas a la temperatura de 450K, ya que como se ha comentado antes, es un potencial que favorece el plegamiento y agrupamiento de segmentos ordenados. En el caso del potencial de Gee, se observan estructuras plegadas en los primeros 10 ns a una temperatura de 450K (aunque menos que en el caso del potencial de Muthukumar).

SIMULACIÓN Y EXPERIMENTOS PARA EL ESTUDIO DEL EFECTO DE LA RAMIFICACIÓN DE CADENA CORTA EN EL ESTADO DE ENMARAÑAMIENTOS DEL POLIETILENO

Se ha realizado un estudio combinado de simulación y experimentos para describir la dinámica molecular del polietileno. A partir de estas simulaciones se ha obtenido la variación del peso molecular entre enmarañamientos y del tiempo de relajación entre enmarañamientos de forma directa y por primera vez para este tipo de materiales, observándose un fuerte efecto para contenidos entre 0 y 40 ramas por cada 1000 átomos de carbono. Los parámetros que definen la conformación molecular están en total acuerdo con resultados experimentales de otros autores obtenidos en disolución diluida y en el fundido. Asimismo, se ha comprobado que las trayectorias de las coordenadas monoméricas varían sistemáticamente con el contenido en ramificación, poniendo de manifiesto diferencias en los procesos dinámicos en el fundido de las que prácticamente no hay evidencias experimentales, dada la dificultad de realizar este tipo de experimentos mediante difracción de neutrones. Sin embargo, la combinación de los resultados obtenidos por simulación avanzada, junto con la aplicación de modelos topológicos, permiten explicar la huella viscoelástica sin utilizar ningún parámetro ajustable.

VISUALIZACIÓN Y RECONSTRUCCIÓN DE LA ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL DE PROTEINAS

A lo largo del año 2009 se ha puesto en marcha el nuevo microscopio electrónico de transmisión JEOL JEM-2100, adquirido en el marco del último Plan Estratégico del Instituto de Estructura de la Materia (IEM). En este contexto se ha abordado el problema de la determinación de estructura tridimensional de complejos biológicos mediante microscopía electrónica de transmisión. Se ha trabajado con especímenes teñidos negativamente de proteínas de estructura conocida, ampliamente estudiadas en la literatura, como la *proteína chaperona GroEL*, una proteína eucariótica que tiene como función ayudar en el plegamiento de proteínas. La puesta a punto de la técnica alcanzará su culminación en un futuro previsible, una vez seamos capaces de estudiar muestras vitrificadas en su estado nativo observadas a temperaturas criogénicas. Al mismo tiempo se ha establecido a finales de 2009 el Grupo de Usuarios del STEM, a través del cual distintos grupos del IEM pueden hacer uso de la técnica de microscopía electrónica de transmisión y barrido.

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES FÍSICAS DE MODELOS MOLECULARES: ESTRUCTURA DEL CATALIZADOR Y TOPOLOGÍA MOLECULAR

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 y catalizadores para síntesis dual. En cuanto

al desarrollo de nuevos materiales bimodales con propiedades específicas obtenidos mediante síntesis dual, se ha obtenido una familia interesante de materiales que ha permitido estudiar de manera sistemática el efecto la presencia de especies de alto peso molecular en las propiedades viscoelásticas y el procesado. El estudio ha puesto de manifiesto el papel crucial que juegan estas especies en funciones viscoelásticas básicas como la viscosidad Newtoniana y el procesado, y forma una parte importante de la tesis doctoral del Dr. Jon Otegui, cuya lectura se ha realizado a finales de 2009.

PROPIEDADES Y NANOESTRUCTURA DE COMPUESTOS DE POLIOLEFINA Y NANOTUBOS DE CARBONO Y DE MODELOS MOLECULARES DE POLIOLEFINAS (COLABORACIÓN USB)

Continuando con el estudio de este tipo de sistemas se han realizado medidas mediante difracción rayos X con objeto de establecer la nanoestructura de este tipo de sistemas tras el procesado, dados los resultados previos obtenidos, en los que se establecía una clara disminución de la viscosidad y del módulo elástico en los materiales compuestos con respecto al polímero base. Los resultados se han atribuido a la adsorción selectiva de las especies de mayor tiempo de relajación sobre la superficie de los nanotubos, lo que tendrá grandes implicaciones en los fenómenos de orientación que se producen durante el procesado y por tanto en la estructura y propiedades finales. En colaboración con la Universidad Simón Bolívar de Caracas, también se han estudiado las propiedades viscoelásticas de modelos moleculares de copolímeros de etileno y monómeros polares (metacrilato de metilo). Los materiales son amorfos y con pesos moleculares elevadísimos, lo que les confiere altos valores de viscosidad y módulo elástico, y provoca que presenten una elevada estabilidad dimensional a pesar de que a temperatura ambiente se encuentren por encima de la transición vítrea.

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

Se ha continuado con la colaboración con la industria, concretamente con la empresa del sector de los materiales poliméricos. 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. La investigación pretende cubrir un objetivo específico: la optimización de las propiedades ópticas y mecánicas de películas biorientadas. Durante el desarrollo de dicha colaboración, se han celebrado reuniones y seminarios periódicos (tri o cuatrimestrales), en los que se han presentado los resultados obtenidos más relevantes.

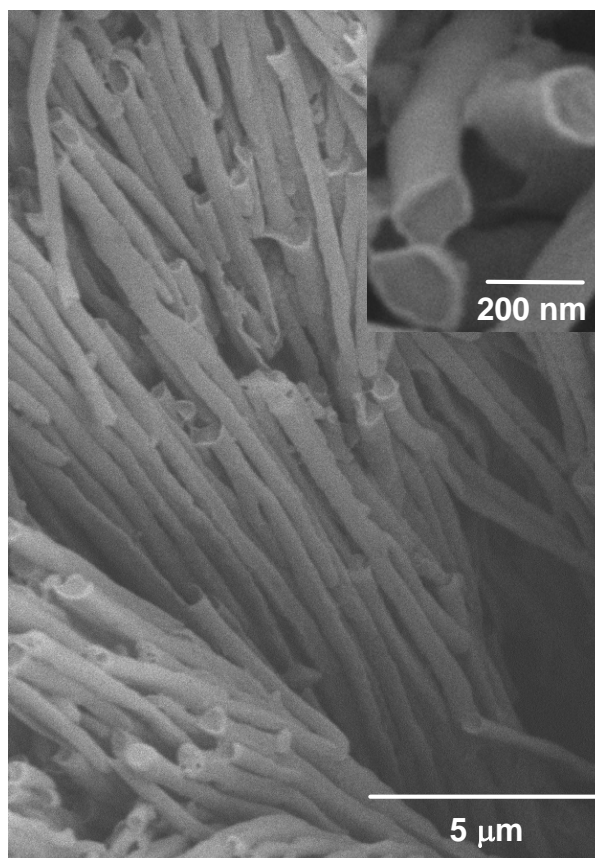
CONFINAMIENTO EN LA ESTRUCTURA Y LA DINÁMICA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA

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.



Micrografías electrónicas de barrido de nanoestructuras de PVDF preparadas mediante mojado en disolución de plantillas: vistas lateral y superior (inset) mostrando la morfología de nanofibras una vez se ha eliminado la plantilla de alumina [Al]

DIAGRAMA DE FASES Y DINÁMICA EN COPOLÍMEROS DIBLOQUE

Los diagramas de fases de copolímeros en bloque formados por dos componentes se han estudiado mediante SAXS y calorimetría diferencial de barrido. Mediante las medidas de SAXS se han determinado las temperaturas de transición orden-desorden y las morfologías adoptadas por dichos sistemas tras el proceso de segregación de fases. Se han estudiado tanto sistemas en el límite de segregación débil, como el copolímero dibloque formado por poli(estireno) y poli(etil metacrilato), como en el límite de segregación fuerte como el formado por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano). El sistema PS-b-PEMA se autoensambla mediante calentamiento dando lugar a una estructura laminar en la que el espesor de los dominios puede ajustarse de forma controlada mediante tratamientos térmicos a distintas temperaturas y tiempos. Una vez caracterizada la estructura, la dinámica de las cadenas de poli(etil metacrilato) se ha explorado selectivamente mediante espectroscopia dieléctrica de banda ancha, observándose una ralentización de la dinámica segmental y cambios en la energía de activación aparente de la relajación α por comparación con el homopolímero de poli(etil metacrilato). Los copolímeros formados por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano) se han estudiado en función de la composición relativa de cada componente, observándose distintas morfologías en función de dicha composición. Se han determinado morfologías laminares, hexagonales y cúbicas. De esta forma es factible elucidar la dependencia de la dinámica confinada de uno de los bloques en función, no sólo del espesor del dominio, sino también de su geometría.

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 y de neutrones, como dinámica, mediante espectroscopia 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 los cambios en la dinámica durante transiciones de fase del desorden al orden en alcoholes primarios, tales como el etanol 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 moléculas desordenadas. 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

Hemos continuado el trabajo de nuestro grupo en nanocompuestos de interés tecnológico. En este tema hemos investigado los mecanismos de conducción en una amplia variedad de sistemas usando como matriz polímeros de uso habitual, cargado con nanoaditivos basados en carbono, en particular, nanofibras y nanotubos. Se han preparado materiales compuestos poliméricos constituidos por poliamida 6,6 (PA66) y diferentes cantidades de nanofibra de carbono (GANF), suministrada por la empresa Antolin Ingeniería S.A. Para ello, se han seguido diferentes métodos de procesado: mezclado en fundido, por disolución y polimerización in situ. Los materiales se han caracterizado morfológicamente (microscopía óptica, SEM) y también se han determinado sus propiedades térmicas (DSC) y eléctricas (espectroscopia dieléctrica). Del análisis preliminar de los resultados se puede concluir que, los materiales procesados por disolución presentan buena dispersión y propiedades eléctricas aceptables para aplicaciones tales como disipación electrostática, apantallamiento electromagnético y pintado electrostático. Cuando se lleva a cabo la polimerización in situ, si bien parece que la carga se encuentra bastante dispersa en la matriz, y los datos indican que se ha alcanzado el umbral percolativo, el valor de la conductividad es inferior que en el caso de los compuestos preparados por disolución. Finalmente, en los materiales procesados a partir del fundido, se ha constatado que existe una mala dispersión de las nanofibras en la matriz y, además, todos los compuestos presentan valores de conductividad que corresponden a materiales aislantes. Este hecho se puede explicar si consideramos la disminución de la relación de aspecto que experimenta la carga como consecuencia de la rotura que sufre durante el proceso de mezclado.

BIOFÍSICA: CONFORMACIÓN DE LA PROTEÍNA DE MEMBRANA INTEGRINA $\alpha_2\beta_{III}$

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 han continuado con experimentos encaminados a obtener información sobre las conformaciones que tiene el complejo Integrina $\alpha_2\beta_{III}$ -Fab 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 MEDIANTE SAXS DE LA CRISTALIZACIÓN DE PET SOMETIDO A CONFINAMIENTO EN PELÍCULAS MULTILAMINARES DE PET/PC

Se ha estudiado el desarrollo de la estructura cristalina de politereftalato de etileno en películas multilaminares de politereftalato de etileno/polycarbonato (PET/PC). Las películas fueron preparadas por el procedimiento de coextrusión multiplicadora en el laboratorio de los profesores E. Baer y A. Hiltner de la Universidad Case Western Reserve en Cleveland, Ohio (Estados Unidos). Se obtuvieron diagramas de dispersión de rayos X (SAXS) durante los experimentos de cristalización isoterma. A 117°C, se ha demostrado que el período de inducción aumenta mientras que la velocidad de cristalización se ralentiza al ir aumentando el grado de confinamiento físico del PET. Por el contrario, el comportamiento de la nucleación es similar para todas las muestras investigadas, por lo que es independiente del espesor de lámina de PET. El análisis de los diagramas de SAXS, mediante la función de distribución de interfases de Ruland y un modelo dual de apilamientos de laminillas cristalinas, ha demostrado que el apilamiento de laminillas de PET está formado en promedio por 3 ó 4 cristales correlacionados. Se determinaron los parámetros estructurales que definen la distribución de espesores cristalinos, l_c , y amorfos, l_a , del sistema de laminillas. Como era de esperar, l_c decrece y l_a aumenta durante la cristalización. Cuando este proceso finaliza, esos valores son prácticamente idénticos para el PET confinado y sin confinar, lo cual indica que los cristales de PET formados son muy similares e independientes del espesor de lámina. Finalmente, se ha observado que la cristalinidad lineal es mucho mayor que la cristalinidad obtenida mediante experimentos de Rayos X a ángulos grandes (WAXS). Esto significa que no todo el volumen de PET está ocupado por apilamientos cristalinos, sino que los apilamientos están separados por amplias zonas amorfas como también sucede en el caso de PET no confinado.

DESARROLLO DE LA NANOESTRUCTURA EN POLÍMEROS MEDIANTE MICRODUREZA DEL ESTADO AMORFO HACIA LAS ESTRUCTURAS MÁS ORDENADAS

Se ha realizado una amplia revisión cubriendo todas las contribuciones que los métodos de indentación han aportado al conocimiento del desarrollo de la nanoestructura en polímeros vítreos y semicristalinos. Como primer punto, se enfatiza la influencia de la historia térmica y del envejecimiento físico sobre la microdureza de polímeros vítreos. Se introduce la relación entre dureza y temperatura de transición vítrea T_g . Se ha confirmado experimentalmente que la microdureza de materiales amorfos por encima de la T_g se aproxima rápidamente hacia cero. Se ofrece una discusión sobre la influencia de la estructura del material de refuerzo sobre la microestructura de matrices poliméricas vítreas. La indentación se revela como un método valioso para el estudio de la cinética de cristalización desde el estado vítreo y se muestran resultados concluyentes para sistemas poliméricos con distinto grado de confinamiento. Se ha recordado también la relación nanoestructura-microindentación en el caso de polímeros semicristalinos y la influencia del grado de cristalinidad y espesor cristalino para varios sistemas flexibles y semirígidos. Diversos resultados experimentales han demostrado que, para polímeros con un grado de cristalinidad pequeño y una T_g por debajo de la temperatura ambiente, existen amplias discrepancias con respecto a la ley de aditividad de microdurezas. Esto es debido a que el mecanismo de deformación es diferente al de los materiales poliméricos con una T_g por encima de la temperatura ambiente. En el caso de materiales orientados, el método de indentación es capaz de detectar la aparición gradual de fases de orden intermedio.

ESTUDIO GENERAL DE LA MOVILIDAD SEGMENTAL EN POLÍMEROS DURANTE LA CRISTALIZACIÓN

Se ha analizado la dinámica molecular de las regiones amorfas en polímeros cristalizables a partir de modelos basados en termodinámica estadística. Para ello, se han recopilado datos existentes en la literatura sobre medidas de espectroscopía dieléctrica en diversos polímeros cristalizables. Se ha obtenido una relación entre magnitudes físicas bien definidas y parámetros característicos del análisis de Havriliak-Negami de procesos simétricos. Se ha encontrado que, para materiales isotrópicos, la relajación molecular está asociada a cambios conformacionales dentro de las regiones de reajuste cooperativo, cuya dimensión característica se ha estimado de ~ 1 nm. Dicha dimensión se ha determinado que aumenta en el caso de sistemas orientados hasta 3 - 5 nm. Se ha discutido que el tamaño de las regiones de reajuste cooperativo puede estar directamente relacionado con el espesor final de las regiones amorfas interlaminares. Finalmente, se ha propuesto un criterio termodinámico que determina el final del proceso de cristalización.

PROPIEDADES MECÁNICAS Y NANOESTRUCTURA DE NANOCOMPUESTOS REFORZADOS CON ARCILLA

Se han estudiado las propiedades mecánicas de nanocompuestos de policloruro de vinilideno (PVC) y bentonita, y su micro- y nano-estructura. Se ha observado que la inclusión de un aditivo ignífugo da lugar a la intercalación de moléculas poliméricas entre las láminas de nanoarcilla. Por el contrario, la adición de un pigmento dispersante favorece la exfoliación de la bentonita. Las propiedades mecánicas del nanocompuesto con arcilla exfoliada no presentan una mejora respecto a la matriz, al contrario, se ha observado una menor resistencia a la fractura. Sin embargo, las propiedades mecánicas del nanocompuesto con matriz intercalada entre las láminas de arcilla muestran un aumento considerable del módulo elástico y la tensión de fluencia. Medidas de difracción de rayos-X a ángulos altos revelan que las láminas de bentonita se encuentran orientadas con sus planos paralelos a la superficie de las películas sólo en el caso del nanocompuesto con aditivo ignífugo. Se sugiere que durante el proceso de deformación, la tensión se concentra en las láminas de arcilla y, en el caso de distribución isotrópica, da lugar a una pérdida de adhesión entre la matriz y el refuerzo.

ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO MODIFICADO MEDIANTE ENTRECruzAMIENTO QUÍMICO

En colaboración con otros grupos de investigación, se ha continuado la caracterización de muestras de polipropileno isotáctico (iPP) entrecruzado de modo reversible por vía química mediante un método patentado recientemente por el Dr. S. Bouhelal de la Universidad de Sétif (Argelia). El material modificado se ha investigado mediante análisis térmico mecánico-dinámico (DMTA), calorimetría diferencial de barrido (DSC), espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y resonancia magnética nuclear de estado sólido (RMN de ^{13}C). El análisis de los resultados obtenidos confirma la formación de cierta proporción de cadenas etilénicas durante el proceso de entrecruzamiento, a expensas del polipropileno inicialmente presente. El aumento de la resistencia al impacto del iPP modificado se atribuye al componente amorfo del polietileno así generado.

ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE MATERIALES NANOCOMPUESTOS DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO ENTRECruzADOS Y ARCILLA

Continuando la línea de trabajo iniciada el año anterior, se han investigado materiales nanocompuestos (“nanocomposites”) de polipropileno isotáctico (iPP) entrecruzado reversiblemente por vía química, y arcilla, preparados mediante un método patentado por el Dr. S. Bouhelal de la Universidad de Sétif (Argelia). Dependiendo del procedimiento utilizado, se ha conseguido incorporar la arcilla en cantidades de hasta un 50 %. Los resultados obtenidos en la caracterización de las muestras por difracción de rayos X a ángulos bajos (SAXS) complementan el estudio realizado anteriormente, e indican que, en la mayoría de las composiciones estudiadas, la arcilla presenta exfoliación parcial. Sin embargo, en el nanocompuesto con un 4 %, la arcilla parece estar totalmente exfoliada. Ninguna de las composiciones estudiadas presenta intercalación.

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 analogs in condensed matter.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.

RESEARCH ACTIVITY:

LOOP QUANTUM COSMOLOGY

During 2009, the Gravitational Physics Group has continued his research in the field of Loop Quantum Cosmology. The investigation has been developed in three main directions: the consolidation of the foundations of Loop Quantum Cosmology, the extension of the results of homogeneous and isotropic models to anisotropic cases, and the inclusion of inhomogeneities to allow the study of cosmological perturbations.

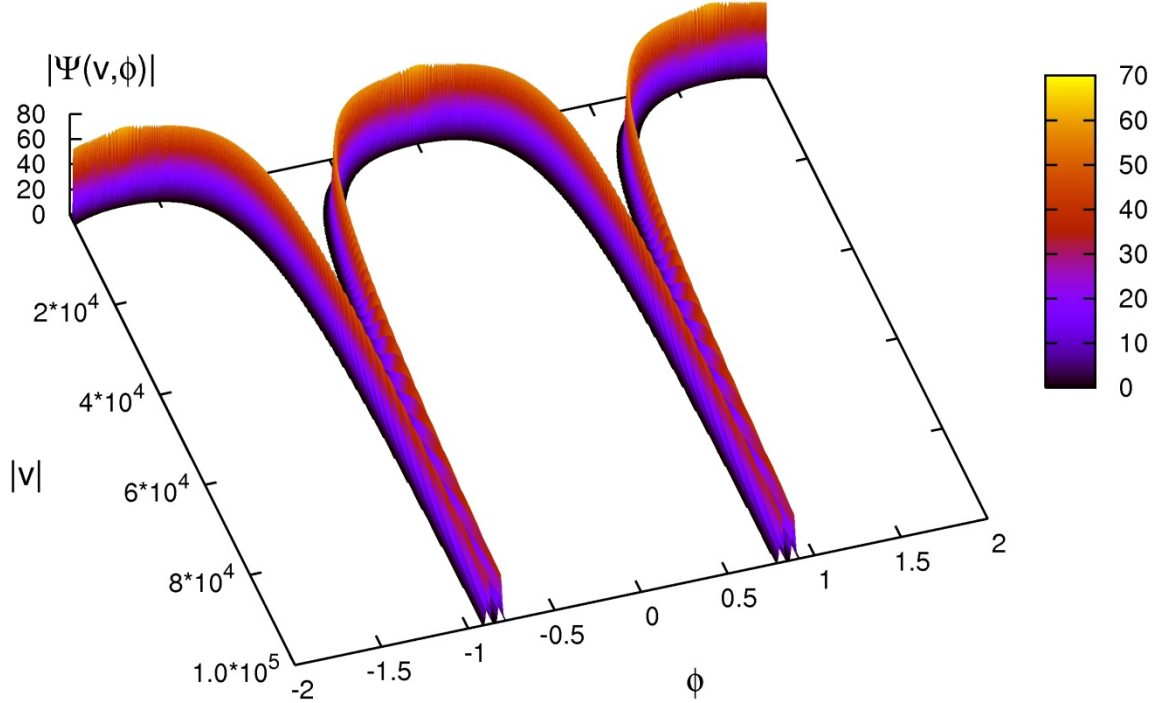
Loop Quantum Gravity has emerged in recent years as a solid candidate for a nonperturbative quantum theory of General Relativity. It is a background independent theory based on a description of the gravitational field in terms of holonomies and fluxes. In order to discuss its physical implications, a lot of attention has been paid to the application of the quantization techniques of Loop Quantum Gravity to symmetry reduced models with cosmological solutions. This line of research is what has been called Loop Quantum Cosmology.

Most of the activity in this field has been focused on the analysis of simple homogeneous and isotropic models. In particular, the flat Friedmann-Robertson-Walker (homogeneous and isotropic) universe with a massless scalar field is a paradigmatic model in Loop Quantum Cosmology. In spite of the prominent role that the model has played in the development of this branch of physics, there still remained some aspects of its quantization which deserved a more detailed discussion. These aspects included the kinematical resolution of the cosmological big-bang singularity, the possibility of identifying superselection sectors as simple as possible, and a clear comprehension of the Wheeler-DeWitt limit associated with the theory in those sectors. We have proposed an alternative operator to represent the Hamiltonian constraint which is especially suitable to deal with these issues in a satisfactory way. In particular, our constraint operator superselects simple sectors for the universe volume, with a support contained in a single semiaxis of the real line and for which the basic functions that encode the information about the geometry possess optimal physical properties. Namely, they provide a no-boundary description around the cosmological singularity and admit a well-defined Wheeler-DeWitt limit in terms of standing waves. Both properties explain the presence of a generic quantum bounce replacing the big-bang singularity at a fundamental level, in contrast with previous studies where the bounce was proved in concrete regimes and focusing on states with a marked semiclassical behavior.

We have also shown that the global dynamics of a homogeneous universe in Loop Quantum Cosmology can be viewed as a scattering process. This picture can be employed to build a flexible method of verifying the preservation of the semiclassicality of the states through the bounce. The method has been applied in detail to two simple examples: an isotropic Friedmann-Robertson-Walker universe and the isotropic sector of a Bianchi I universe. In both cases, the dispersions in the logarithm of the volume and in the logarithm of the scalar field momentum are related in the distant future and past. This leads to a strict preservation of the semiclassicality.

In addition, we have studied the self-adjointness of the evolution operator corresponding to a flat Friedmann-Robertson-Walker universe with a massless scalar field and a positive cosmological constant, described in the

framework of Loop Quantum Cosmology. It has been shown that, if the cosmological constant is smaller than a certain value, the operator admits many self-adjoint extensions, each of them with a purely discrete spectrum. On the other hand, when the cosmological constant is larger than the mentioned value, the operator is essentially self-adjoint, although the physical Hilbert space does not contain any physically interesting state in this case.



Evolution of the wave function of a flat Friedmann-Robertson-Walker universe in the presence of a positive cosmological constant showing the occurrence of quantum bounces.

We have also studied thoroughly the anisotropic cosmological model consisting of a vacuum Bianchi I universe, as an example to investigate the concept of physical evolution in Loop Quantum Cosmology in the absence of the massless scalar field which is frequently used as an internal time. In order to retrieve the system dynamics when no such a suitable clock field is present, we have explored different constructions of families of unitarily related partial observables. These observables are parameterized, respectively, by one of the components of the densitized triad, or by its conjugate momentum; each of them playing the role of an evolution parameter. Exploiting the properties of the considered example, we have investigated in detail the domains of applicability of the introduced constructions. In both cases the observables possess a neat physical interpretation only in an approximate sense. However, whereas in the first case such interpretation is reasonably accurate only for a portion of the evolution of the universe, in the second case it remains so during all the evolution. We have used these families of observables to describe the evolution of the Bianchi I universe. Our analysis confirms the robustness of the bounces, also in absence of matter fields, as well as the preservation of the semiclassicality through them.

Besides, as a necessary step towards the extraction of realistic results from Loop Quantum Cosmology, we have analyzed the physical consequences of including inhomogeneities. We have considered the quantization of a gravitational model in vacuo which possesses local degrees of freedom, namely, the linearly polarized Gowdy cosmologies with the spatial topology of a three-torus. We have carried out a hybrid quantization which combines loop and Fock techniques. This quantization resolves the cosmological big-bang singularity, and permits a rigorous definition of the quantum constraints, as well as the construction of their solutions. We have determined the Hilbert structure of the space of physical states and, furthermore, recovered from it a conventional Fock quantization for the inhomogeneities.

The theoretical research of the group has been complemented with work on the numerical front of classical and quantum general relativity. For instance, we have created a tensor computer algebra package called xPert, for fast construction and manipulation of the equations of metric perturbation theory, around arbitrary backgrounds. This package is based on the combination of explicit combinatorial formulas for the n-th order perturbation of curvature

tensors and their gauge changes, and the use of highly efficient techniques of index canonicalization, provided by the underlying tensor system xAct (also made by one of us) for Mathematica.

In addition, using efficient symbolic manipulations tools developed by us, we have presented a general gauge-invariant formalism to study arbitrary radiative second-order perturbations of a Schwarzschild black hole. In particular, we have constructed the second order Zerilli and Regge-Wheeler equations under the presence of any two first-order modes, reconstructed the perturbed metric in terms of the master scalars, and computed the radiated energy at null infinity. Our results enable systematic studies of generic second order perturbations of the Schwarzschild spacetime. In particular, studies of mode-mode coupling and non-linear effects in gravitational radiation, the second-order stability of the Schwarzschild spacetime, or the geometry of the black hole horizon.

On a different front, we have analyzed the Hawking radiation process due to collapsing configurations in the presence of superluminal modifications of the dispersion relation. With such superluminal dispersion relations, the horizon effectively becomes a frequency-dependent concept. In particular, at every moment of the collapse, there is a critical frequency above which no horizon is experienced. We have shown that, as a consequence, the late-time radiation suffers strong modifications, both quantitatively and qualitatively, compared to the standard Hawking picture. Concretely, the radiation spectrum becomes dependent on the measuring time, on the surface gravities associated with different frequencies, and on the critical frequency. Even if the critical frequency is well above the Planck scale, important modifications still show up.

QUANTUM GRAVITY

One of the most important problems in quantum gravity is the identification of the microscopic degrees of freedom that give rise to the entropy of black holes. If these can be unambiguously described and counted, the entropy of a black hole can be computed. The relationship between entropy and area is given by the famous Bekenstein-Hawking formula that states that the entropy is one fourth of the horizon area (in the appropriate units). The two leading candidates for quantum theories of gravity -string theory and loop quantum gravity- both account for this law. In the case of loop quantum gravity the result has been known for more than a decade now, however, it has been recently discovered that the entropy of microscopic black holes, as described within loop quantum gravity, displays an unexpected behavior consisting in a periodic modulation of the otherwise linear growth with the area. The understanding of this phenomenon has been one of the research problems that our group has worked on during the last year. To this end we have successfully developed, together with our collaborators in Valencia and Warsaw, methods based on number theory and combinatorics that have allowed us to gain a deeper understanding on this issue. Among them the most useful ones have been the identification of a set of diophantine equations that help in the exact solution of the counting problem and the successful introduction of generating functions for the entropy. We have also found a way to connect these results with the more standard methods using Laplace transforms.

The results that we have obtained are manifold. First we have been able to show that the observed modulation in the entropy can be present for macroscopic areas (though the exact asymptotic behavior has yet to be obtained). This result is a consequence of the subtle way in which the asymptotic behavior of the entropy is given by the integral expressions (inverse Laplace transforms) that express the entropy as a function of the area. Specifically the accumulation of the real parts of the poles in the integrand to the value that fixes the linear growth of the entropy is compatible with the linear behavior given by the Bekenstein law but leaves room to a subdominant periodic correction that could explain the observed behavior of the microscopic black hole entropy.

We have taken advantage of the methods that we have developed in order to compute the black hole entropy for some alternative non-standard proposals. In particular we have considered a different definition for the area operator that is used in the definition of the entropy. As is well known, in the case of isolated horizons (as opposed to arbitrary closed surfaces) it is possible to consider definitions for the area different from the usual one, [though it must be said that the standard one, with its non-equally spaced spectrum, is the preferred one]. Among these there is a very simple and natural choice that gives rise to an equally spaced spectrum. This has some consequences as far as the definition of the entropy is concerned. In collaboration with Jerzy Lewandowski (Warsaw University) we have explored the physical consequences of adopting the modified definition and have checked that the expected entropy behavior is indeed present. A remarkable feature of this work is the fact that we have been able to obtain exact, closed form expressions for the entropy and reproduced the Bekenstein-Hawking law. Finally another application of our methods has been the computation of the entropy in the new scheme recently put forward by Engle, Noui and Perez to define black hole entropy in loop quantum gravity by using a $SU(2)$ Chern-Simons theory at the horizon to describe the black hole degrees of freedom.

During the last year our group has continued with its traditional line of work on the quantization of midisuperspace models -in particular the Gowdy universes- both within standard quantum field theory and loop quantum gravity. In this respect we have devoted some effort to develop in detail the aspects referring to the quantization of the

harmonic oscillator with time-dependent frequency, that could be exported to the Gowdy models. We would like to highlight that the Gowdy models can be thought of as field theories described by an infinite number of such time-dependent oscillators. The methods used in this analysis have been manifold and have significantly extended previous existing work on this area. By relying on them a Schrödinger functional representation has been constructed and several problems have been addressed, in particular the unitary definition of the dynamics and the existence of semiclassical states.

The research activity in gravitational physics has been completed with the following contributions:

Modified Gravity: We have deepened into the study of modified theories of gravity in the Palatini formalism to determine the ability of those theories to generate nonsingular cosmologies. We have focused our attention on theories of the $f(R)$ type in Friedmann-Robertson-Walker Universes. We have found that the conditions for the existence of a cosmic bounce are quite generic, being determined solely by the existence of a zero in the derivative of the Lagrangian $f(R)$. Remarkably, we have obtained an $f(R)$ Lagrangian which exactly reproduces the effective dynamics of LQC with a massless scalar, which shows the potential of this kind of theories to capture certain aspects of quantum gravity phenomenology and motivates further research in this direction.

Inflationary Cosmology: We have studied the generation of primordial perturbations in a (single-field) slow-roll inflationary universe. In momentum space, these (Gaussian) perturbations are characterized by a zero mean and a non-zero variance. However, according to the standard treatments in the literature, in position space the variance diverges in the ultraviolet. We have reconsidered the calculation of the variance in position space using well-established methods of renormalization of quantum fields in curved space. We have found that this affects the predicted scalar and tensorial power spectra for wavelengths that today are at observable scales. As a consequence, the imprint of slow-roll inflation on the CMB anisotropies is significantly altered as compared to the standard predictions found in the literature. In particular, we have found a non-trivial change in the consistency condition that relates the tensor-to-scalar ratio to the spectral indices. The influence of relic gravitational waves on the CMB may soon come within the range of planned measurements, offering a non-trivial test of the new predictions.

Black Holes: A disturbing aspect of Hawking's derivation of black hole radiance is the need to invoke extreme conditions for the quantum field that originates the emitted quanta. It is widely argued that the derivation requires the validity of the conventional relativistic field theory to arbitrarily high, trans-Planckian scales. Using the correlation functions of the matter quantum field, we have shown that this is not necessarily the case if the question is presented in a covariant way. We have found that Hawking radiation is robust against an invariant Planck-scale cutoff.

ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE

During 2009 we have continued the theoretical investigation of the electronic properties of the so-called graphene, that is, a material made of a one-atom-thick sheet of carbon atoms, coordinated with the typical honeycomb structure of the graphite layers. Since its discovery in 2004, the research on graphene has raised mounting interest in the condensed-matter community, as the genuine two-dimensional character of the material has led to expect unconventional properties regarding its electronic, optical, and elastic behavior. Our investigation has focused on the analysis of superconducting instabilities of graphene at large doping levels, as well as on the study of the effects of curvature on this peculiar metallic membrane.

The investigation of the ground state of graphene at large doping levels has been undertaken in collaboration with a prominent experimental group from the Lawrence Berkeley National Laboratory. One of the key observations of this group has been that, under suitable conditions of chemical doping, the Fermi level can be tuned to the Van Hove singularity in the conduction band of the two-dimensional carbon material. It is known that the divergent density of states in the vicinity of that kind of singularity may lead to different types of instabilities in the two-dimensional electron liquid. In our case, we have modeled the specific geometry of the extended saddle-points that arise in the conduction band of graphene, which tend to develop ridges with almost flat dispersion along the boundary of the Brillouin zone. This extended character of the singularity had only precedent in the observation of the band dispersion of high-temperature superconductors. The theoretical analysis has shown indeed that superconductivity is one of the possible electronic instabilities that may appear when graphene is close to the Van Hove singularity in the conduction band. We have reached that conclusion by computing the BCS vertex conveniently dressed within the random-phase approximation, and finding the renormalized e-e couplings in the different representations of the point symmetry group. Near the Van Hove singularity, the strong modulation of the density of states along the Fermi line leads always to the existence of a negative coupling, which triggers the superconducting instability at sufficiently low temperature. We have complemented this analysis by looking also for a possible magnetic instability in the system, which could arise as a consequence of the large density of states near the Van Hove singularity. For that purpose, we have computed the magnetic susceptibility as a function of the

temperature to check its divergence against the strength of the pairing instability, finding out that the latter prevails throughout all the range of relevant values of the bare Coulomb repulsion and chemical potential about the Van Hove singularity. Combined with the experimental side of the collaboration, our results have supported the idea that doped graphene can achieve an electronically-mediated superconductivity, provided that the doping is in the vicinity of the Van Hove singularity and the lattice symmetry is preserved, i.e. the chemical dopants do not introduce new states near the singularity to disrupt the bandstructure.

On the other hand, we have studied the effects of strong curvature in graphene continuing with our investigation of the carbon nanotube-graphene junctions. In this regard, it is quite promising that such hybrid structures have been already produced in the Fujitsu laboratories, while it is also conceivable that graphene wormholes may be fabricated starting from the easily available graphene bilayers. Our theoretical analysis has focused on wormhole geometries in which a short nanotube acts as a bridge between two graphene sheets, where the honeycomb carbon lattice is curved from the presence of 12 heptagonal defects. By taking nanotube bridges of very small length compared to the radius, we have developed an effective theory of Dirac fermions to account for the low-energy electronic properties of the wormholes in the continuum limit. In this construction, we have included appropriately the effect that the heptagonal carbon rings induce on the Dirac fields encoding the low-energy electronic excitations of the carbon material. This action has been mimicked by attaching a line of fictitious gauge flux at each topological defect, following the same procedure applied long time ago in the case of the fullerene lattices. The graphene wormholes represent actually an instance which can be considered to some extent dual to the case of the fullerenes, as the 12 pentagonal carbon rings in those closed lattices play a role opposite to that of the heptagonal defects in the wormhole. We have found in particular that, when the effective gauge flux from the topological defects becomes maximal, the zero-energy modes of the Dirac equation can be arranged into two triplets, which can be thought as the counterpart of the two triplets of zero modes that arise in the continuum limit of large spherical fullerenes. We have further investigated the graphene wormhole spectra by performing a numerical diagonalization of tight-binding Hamiltonians for very large lattices realizing the wormhole geometry. In this way, we have shown the correspondence between the number of localized electronic states observed in the numerical approach and the effective gauge flux predicted in the continuum limit. We have then concluded that graphene wormholes can be consistently described by an effective theory of two Dirac fermion fields in the curved geometry of the wormhole, opening the possibility of using real samples of the carbon material as a playground to experiment with the interaction between the background curvature and the Dirac fields. It is therefore plausible that the study of these condensed matter systems may allow the investigation of relevant gravitational effects related to the Dirac character of the electron quasiparticles, which otherwise would be only accessible at the much higher energies typical of the astrophysical phenomena.

2B.2 NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei.
- Nuclear Structure studies done by beta-decay. Decay modes and breakup mechanisms of excited 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.
- Fundamental Nuclear Physics.
- Nuclear structure.
- Nuclear Structure and Reactions of Stable and Exotic Nuclei.
- Three-body systems in Nuclear Physics.
- Nuclear reactions involving few-body systems.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Quantum integrability and exactly solvable models.
- Systems devoid of long-range order.
- 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.

- Direct nuclear reactions.
- Nuclear structure.
- Nuclear masses.
- Phase transitions.
- 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.
- Hierarchical Mean Field.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamics of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.

TECHNIQUES:

- Gamma-gamma coincidence, detection of charged particles.
- Detection in complete kinematics of all particles and fragments emitted in the reaction, determining the energies as well as emission angles in order to be able to reconstruct the invariant mass. Development of the experimental systems and electronics.
- Theoretical and Mathematical Physics.
- Group Theory.
- Many-body theory.
- Computational methods.
- Selfconsistent Mean Field Calculation Techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space. The hyperspherical adiabatic expansion method.
- Solutions of non linear coupled equations.
- Density matrix renormalization group and large scale diagonalizations.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Absorption techniques.

RESEARCH ACTIVITIES:

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES RELEVANT IN STELLAR NUCLEAR-SYNTHESIS PROCESSES

Along the years 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 2003-2008 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 $^4\text{He}(\alpha n, \gamma)^9\text{Be}$ reaction rate. This reaction is an alternative to the triple-alpha fusion in neutron-rich stellar scenarios. 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 work 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, 2009). Comparison between the energy of the proton feeding the state in ^{12}C and the 3α -energies detected allows to determine the existence of γ -desexcitation between unbound states (Phys. Rev. C, 2009). The analysis is very advanced and is the subject of the Ph.D. work of our I3P-CSIC fellow, Martín Alcorta.

The study of beta-delayed charged particles is a wonderful tool of information on excited states and their decay modes and mechanisms. Along this 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 $2\alpha+n$ channels. These studies recreate a miniature multi-fragmentation. A experiment was performed at ISOLDE, CERN, in September 2007 to confirm new channels of

breakup involving isotopes of helium. The experimental system was improved to increase the detection efficiency of charged particles in coincidence. 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 2009). 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 2009). This is the Ph.D. work of our FPU fellow Miguel Madurga, who defended the thesis in December.

In the same direction the beta-decay of ^{17}Ne has been studied at ISOLDE (CERN). This is the lightest bound isotope of Neon and decay both by beta-delayed protons and alphas. To know which one occurs first is of astrophysical relevance. The experimental apparatus consisted of an hemisphere of Si-detectors of 15 cm radius. This setup allows for time-of-flight studies that permit to distinguish proton from alphas. The study of the spectrum in term of R-matrix allows for the determination of branching ratios and the energies of the intermediate states in ^{17}F , ^{16}O , ^{13}N and ^{12}C involved in the process. This work together with the study of beta-delayed process of light-argon isotopes (Phys. Rev. C accepted) is the subject of the Ph.D. work of our FPI fellow, Ricardo Domínguez Reyes.

The reaction $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ is of great astrophysical interest as constitutes one of the main source of uncertainties of the solar neutrino flux coming from the decay of ^8B produce in the $^7\text{Be}(p,\gamma)^8\text{B}$ reaction. Thus the reaction cross section at different energies and the extrapolated astrophysical factor $S_{34}(0)$ are of great importance of the astrophysical models. The $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ reaction cross section has been measured at CMAM at the end of November 2008 at several energies between 2.3 and 5.3 MeV. The ^7Be produced in the reaction was collected in the Cu-foil. By counting the number of incoming projectiles and knowing the thickness of the target plus the ^7Be ions produced the cross section was extracted for each energy, and the $S_{34}(0)$ derived. This is the Diploma work of our JAE-predoc student Mariano Carmona.

DIPOLE POLARIZABILITY STUDY OF HALO NUCLEI

One of the most important and unexpected discoveries of Nuclear Pphysics 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. We have studied two neutron halo nuclei such as ^6He , see 2006 annual report, and in 2008 we measured ^{11}Li at TRIUMF (Canada) and the one neutron halo ^{11}Be (Eur. Phys. J A, 2009).

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 and that the description of the breakup channels require coupling to the continuum. The Ph.D. work of Diego Escrig dealt with this topic and defended his thesis in September. Our student Mario Cubero analyzes data from ^{11}Li . A popularitaton of this experiment and the team can be found at the TRIUMF web page <http://www.triumf.info/?headline=172>.

NUCLEAR STRUCTURE AT HIGH ANGULAR MOMENTUM IN OSMIUM AND IRIDIUM ISOTOPES

In 2009 our PhD student Victor Modamio continued to work on the analysis of data taken in an experiment performed at the LNL Legnaro (Padova, Italy) using an incomplete fusion reaction to study the high-spin structure of some Os and Ir isotopes. In ^{188}Os we were able to study for the first time the band crossing between the ground state band and the t-band with $K^\pi=10^+$. Furthermore a number of new multi-quasiparticle states with high K have been identified and their decay characteristics studied. This allowed us to test whether K is still a good quantum number in these nuclei. The results concerning ^{188}Os have been published this year. The rest of the data from this experiment, especially with respect to the ^{187}Ir and $^{187,189}\text{Os}$ isotopes, has been finished and currently we are preparing these results for publication. Victor Modamio will handle in his PhD thesis in February 2010.

LIFETIME AND MAGNETIC MOMENT MEASUREMENTS IN TIN ISOTOPES

Lifetimes and magnetic moments of excited states are crucial for the understanding of the structure of a certain nucleus of interest because they yield very direct information about the wavefunction of the state and therefore allow for stringent tests of different theoretical calculations. In case that the lifetime of the state of interest is very short, in the range of ps or even below, techniques based on the Doppler effect and the transient magnetic fields, respectively, have to be employed to measure its lifetime and magnetic moment. In 2009 we have been responsible for an experiment aiming for a measurement of the lifetimes and magnetic moments of the first 2^+ states in $^{122,124}\text{Sn}$ performed at the UNILAC accelerator (GSI, Germany) and a second experiment at REX-ISOLDE dedicated to the measurement of $g(2^+)$ in ^{138}Xe using a radioactive Xe beam. First results about the excited state lifetimes from the UNILAC experiment together with the results of a similar experiment performed in 2007 to study the lighter tin isotopes $^{112,114,116}\text{Sn}$ have already been submitted for publication. At the moment our PhD student Jennifer Walker is working on the determination of g-factors from this experiment which has been realized using four large volume Cluster detectors (with a total of 28 individual Ge crystals).

With the idea to extend our activities with respect to magnetic moment measurements with radioactive ion beams we prepared a new experimental proposal to measure g-factors in nuclei close to doubly-magic ^{132}Sn for the first time at relativistic energies at GSI and this proposal has been approved in September 2009.

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 the subject of the PhD work of Lucia Caceres 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 followed: the first, linked to our experiments at low energy, is dedicated to the design and construction of a extremely thin $\Delta E+E$ telescope for the detection and separation in mass of low energy charged particles, along with a multiplexed electronic readout system that allows for simultaneous analysis of 512 detector channels. This system was successfully tested with stable beams of Na, Si and Mg accelerated between 2 and 30 MeV using the tandem accelerator of the CMAM (Center for Micro Analysis of Materials) at the University of Autonoma de Madrid. We have managed to separate and identify the different isotopes and their emission angle and energy.

The second line of work is performed within the R3B collaboration at 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 detector composed of 3cm $\text{LaBr}_3(\text{Ce}) + 5\text{cm } \text{LaCl}_3(\text{Ce})$ was made. The objective, which was obtained with success, was to separate and to identify the pulses of each individual crystal of the Phoswich, using one single readout.

REACTIONS INDUCED BY BORROMEAN NUCLEI

Study of the reactions induced by Borromeon nuclei like ${}^6\text{He}$ and ${}^{11}\text{Li}$, developing the appropriate theory and computational programs in order to calculate elastic and breakup scattering observables. First, it is necessary to treat properly the structure of this kind of exotic nuclei formed by three particles, a core plus two valence neutrons.

LOW ENERGY CALCULATIONS IN NUCLEAR STRUCTURE

In the framework of the interacting boson model we tackle the problem by which the Hamiltonian parameters are determined by fitting the potential energy surface to the obtained with mean field methods. This method is feasible, but still has to be developed. This work is in progress.

The interacting boson model has been checked to see if it is able to reproduce the critical point symmetry $X(5)$, by fitting the excitation energy levels which $X(5)$ provide. The fit has been possible and we are writing a paper for publication with the results that we obtained.

We calculated the nuclear matrix elements present in the half-life of neutrinoless double beta decay of the isotopes ${}^{136}\text{Xe}$, ${}^{148}\text{Nd}$ and ${}^{154}\text{Sm}$, using the interacting boson model. In addition we obtained the occupation probabilities of the single particle levels in the nuclear major shells, comparing well with the probabilities obtained from proton or neutron transfer reaction experiments.

PARITY VIOLATING ELASTIC ELECTRON SCATTERING

Electron-nucleus scattering has been in the past an excellent tool for studying the nuclear structure. Much reliable information on electromagnetic form factors and charge density distributions has been accumulated for stable nuclei and it is expected that the new facilities at GSI (Germany) and RIKEN (Japan) will provide a good opportunity to extend the study of the charge density to unstable nuclei as well. Unfortunately, a measurement of the neutron density distribution to a precision and detail comparable to that of the proton one is hardly possible. Progress in our knowledge of the neutron densities has been limited by the use of hadronic probes that are subject to large and controversial uncertainties because of the not well known reaction mechanism. The measured neutron densities are still model-dependent and the error bars are much larger than those of proton densities due to the uncertainties inherent to the strong interaction. As a result, no existing measurement of neutron densities or radii has an established accuracy of 1%. A new possibility over the hadronic probes could be the direct measurements of the neutron density form factors from the asymmetry in parity-violating (PV) elastic polarized electron scattering. PV electron-nucleus scattering arises from the interference of electromagnetic and weak neutral amplitudes and it is a clean and powerful tool for measuring the spatial distribution of neutrons in nuclei with unprecedented accuracy. Contrary to the strong force, the electroweak interaction is perfectly known and therefore information on the nuclear structure can be extracted in a clean way. While the standard parity conserving electron scattering is sensitive to the nuclear charge distribution, parity violating electron scattering is mainly sensitive to the neutron distributions. Thus, these experiments will allow one to measure a nuclear weak-charge density distribution and finally to determine the neutron distribution with a highly improved accuracy as compared to hadronic probes, which could be calibrated afterward to reproduce more precisely that information. Taking ${}^{208}\text{Pb}$ as an example, we have calculated the expected asymmetries within selfconsistent mean field calculations.

However, the first motivation for studying PV electron scattering from nuclei was to use it as a tool to extract information on the weak neutral current and thereby to test the validity of the Standard Model in the low-energy regime. This possibility lies in the fact that the PV asymmetry acquires a very simple, model-independent expression, in terms of basic coupling constants. This is so because nuclear structure effects cancel out when certain conditions are met. One of these conditions is that isospin is an exact symmetry in the nucleus, but isospin mixing takes place in the nucleus. Understanding the sensitivity of PV electron scattering to the nuclear isospin mixing is crucial to determine the precision up to which the Standard Model constants can be deduced and to what extent strangeness effects in the weak neutral currents can be studied. For that purpose, we have studied various $N=Z$ nuclei and have evaluated the effect of the isospin mixing on the asymmetries.

NUCLEAR SHAPE TRANSITIONS FROM SELFCONSISTENT CALCULATIONS

The evolution of the atomic nuclei ground-state shapes as the number of their constituents changes is an active research field that has been recently addressed both experimentally and theoretically. From the theoretical side, the problem has been addressed from many different points of view. Geometrical and algebraic models, as well as microscopic models based on shell model or mean field approaches have been considered. The shape evolution is described differently depending on the approach adopted. Thus, in algebraic models like the Interacting Boson

Model (IBM), shape changes correspond to the breaking of the dynamic symmetries of the model and are considered as phase transitions. In the shell model, nuclear deformation and its evolution occurs due to configuration mixing. From a mean field point of view, shape changes arise when the deformed single-particle levels are energetically favored to a different degree in open shell nuclei.

In this work we investigate shape transitions within non-relativistic 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. We also study various isotopic chains in which the occurrence of shape transitions has been predicted and we show results for the potential energy surfaces (PES) corresponding to constrained mean field calculations. In particular, we focus our attention to the oblate-prolate shape transition in neutron-rich Yb, Hf, W, Os, and Pt isotopes. The theoretical framework is based on both the self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov approximation with the finite range and density-dependent Gogny interaction (D1S), and the self-consistent 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 is also considered and discussed in those nuclei where this degree of freedom could be relevant.

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 are 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 waiting points. We also investigate pure nuclear reactions, in particular the ones corresponding to a two-body projectile hitting a target. We exploit the particularities of the adiabatic potentials to distinguish in a clean way between the different channels (elastic, inelastic or rearrangement).

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 three-body radiative capture processes involving alpha particle and neutrons. These reactions play an essential role in the bridging of the $A=5$ and $A=8$ gaps. Finally, we have derived the so called integral relations for reactions involving three particles (in particular for 1+2 reactions). We have shown how, by use of these integral relations, the adiabatic approach becomes a very powerful tool that permits an accurate extraction of the reaction S-matrix, also for multichannel processes.

EXACTLY SOLVABLE MODELS

During 2009 we have done significant advances in the study, generalization and applications of the Richardson-Gaudin (RG) models to several strongly correlated systems.

We have studied the realization of RG models in terms of the $so(6)$ algebra. The $so(6)$ algebra describes fermionic systems with three intrinsic degrees of freedom, which means three-component fermions. These systems based on atoms in three hyperfine states are now produced and studied in Laboratories. If the atomic interaction is approximated by color invariant pairing Hamiltonian, the system is integrable and exactly solvable. We profit from exact solvability to study the polarization phenomena in systems with three-color atoms. 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 new found unbreached superfluid phase that arose from the exact solution. We proposed experiments that could detect these new phases.

We have extended the SU(2) RG models (two components) to the complex space and we analyzed the Exceptional Points (EP). An exceptional point is defined as the value of the interaction strength at the position of a level crossing. Level crossings or degeneracies are allowed in the real axis if the system is integrable but forbidden if it is chaotic. The dynamics of level crossings in the complex parameter space sheds new light in the interplay between chaos and regularity.

LARGE SCALE CALCULATIONS IN LOW DIMENSIONAL SYSTEMS

Ultracold Bose or Fermi gases confined in optical lattices have become an important instrument for investigating the physics of strong correlations. The parameters and dimensionality of these systems can be tuned with very high precision and control. High spin fermions can be directly studied with cold atoms in more than two hyperfine states. For the simulations of these kind of systems confined in one-dimensional optical lattices we have used large scale calculations using the Density Matrix Renormalization Group algorithm. We have shown the presence of large amplitude density waves. These density waves are pinned due to the confining potential that traps the atoms in the optical lattice and can be considered a crystal phase of strongly bound trions. We show that the crystalline phase is incompressible and robust against anisotropic interactions. We also show that it is generic in the presence of the trap due to its incompressibility. We have studied the crossover between a trionic superfluid and the crystalline state as a function of the intensity of the interaction and as a function of the anisotropy of the interaction.

HIERARCHICAL MEAN FIELD

We develop a new methodology to treat strongly correlated spin systems in two dimensional lattices. It is based on the recognition of the relevant degrees of freedom of the system that we treat exactly, and the rest of the interaction is approximated in mean field. Thus, by performing educated, manifestly symmetry-preserving mean-field approximations, we unveil fundamental properties of the system. In this work we studied the frustrated Heisenberg model J1-J2. We then compare various coverings of the square lattice with plaquettes, dimers, and other degrees of freedom, and show that only the *symmetric plaquette* covering, which reproduces the original Bravais lattice, leads to the known phase diagram. The intermediate quantum paramagnetic phase is shown to be a *_singlet_plaquette crystal*, connected with the neighboring Néel phase by a continuous phase transition. We also introduce fluctuations around the hierarchical mean-field solutions, and demonstrate that in the paramagnetic phase the ground and first excited states are separated by a finite gap, which closes in the Néel phase.

In a second work we address the physical mechanism responsible for the emergence of magnetization plateaux in the Shastry-Sutherland model. By using a hierarchical mean-field approach, we demonstrate that a plateau is stabilized in a certain spin pattern, satisfying local commensurability conditions derived from our formalism. Our results provide evidence in favor of a robust local physics nature of the plateau states and are in agreement with recent NMR experiments on $SrCu_2(BO_3)_2$.

DECOHERENCE AND QUANTUM PHASE TRANSITIONS

Along the 2009 we continued with the study of the relationship between excited state quantum phase transitions and the decoherence induced by a critical environment in a central small system. We used the boson Lipkin Hamiltonian to model for the environment. This Hamiltonian is a paradigmatic example of the generic class of two-level Hamiltonians, which can go through first-order and continuous excited state quantum phase transitions, and therefore covers a wide range of physical situations. This work was done in collaboration with the group of J.M. Arias, of the University of Seville. Some of the results are part of the Ph. D. project of Pedro Pérez Fernández, a student of the same university.

Our main result is that an environment that goes through a continuous excited state quantum phase transition can destroy completely the quantum coherence of a small system that interacts with it. If the system-environment coupling entails an energy transfer to the environment that equals the critical energy of the continuous excited state quantum phase transition, the decoherence becomes maximal, and all the non-diagonal elements of the reduced density matrix of the system decay fastly to zero. Physically, it means that any superposition state of the central system transites to a classical mixture, and therefore its purely quantum character is lost. On the other hand, a first-order excited state quantum phase transition does not entail any relevant consequence in the central system.

These results have been obtained by means numerical calculations in large bosonic systems, up to 10,000 particles. A theoretical analysis by means Tamm-Dankof approximations gives a good semi-quantitative description, except in the critical region.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANO-SCALES

Probably molecular hydrogen (H_2) is the most obvious candidate to replace petroleum derivatives as an energy vector environmentally neutral. A safe and efficient H_2 storage presents, however, a series of unsolved technological challenges. One possible solution is the adsorption of H_2 at low temperatures in light enough nano-structured materials. Despite the technological importance of the phenomenon the microscopic nature of the interactions of H_2 with such systems is far from being well understood. During 2009 we have studied this aspect of the adsorption of H_2 in a series of carbon systems using adsorption measurement techniques both at constant temperature and as a function of it (in the latter case using a technique developed within our research group) as well as several neutron scattering techniques. We have established that in the case of nano-structured carbon, the defects, always present in a high density in this kind of structures, only weakly alters the energetics of the interaction between carbon and H_2 , achieving the highest adsorption capacities through extreme confinement mechanisms dominated by geometric/ topological effects. That is, energy barriers do not dominate the adsorption efficiency but entropic ones. In other words, a trapped molecule of H_2 can always escape through a way surmounting rather shallow energy barriers but the probability of finding such a way out is sufficiently low. This imposes limits on the adsorption capacities of non-doped carbon materials. However, we have also discovered that these limits are strongly increased when the material can change structurally during the adsorption process.

Probably the most direct microscopic information of the interaction of H_2 with the substrate is obtained by probing with neutron inelastic scattering the rotational dynamics of the molecule (of a quantum nature in the case of H_2) altered due to the interaction molecule/substrate. With in this respect, we could perform for the first time a measure of a fundamental character that was still missing. Relying on a complex neutron technique (neutron spin echo three-axis configuration) and working with energy transfer outside the quasielastic condition usual in the technique, we got sufficient resolution to measure the natural line width of the rotation of the H_2 molecule within the crystalline phase.

Another type of nano-structures with a high technological interest are latex crystals, that is, crystals formed by self-assembly of nanoscale particles of artificial latex. Good quality crystals of this type serve as templates for the generation of nano-structures with a wide range of applications from catalysis to optoelectronics. During 2009 we have developed a numerically efficient original theory to describe the scattering of radiation (diffraction) within this type of system, probably the most accurate technique to obtain internal structural information. Thanks to this development we have modeled exhaustively and quantitatively measured diffraction patterns (synchrotron radiation in this case). From the modeling of just one case we have started to draw some interesting conclusions. First, the fcc structure is strongly favored over other possible configurations energetically equivalent confirming some earlier reports. Secondly, the initial spherical particles inside the crystal are deformed in an appreciable degree. Finally, it is essential to take into account the radial dependence of the scattering length within the nano-particles for a complete modeling of the measurements. Moreover, we have developed a method to obtain these from the crystal diffraction.

MICROSCOPIC STRUCTURE AND DYNAMICS OF DISORDERED CONDENSED MATTER

The wealth of microscopic structures of condensed matter goes far beyond traditional crystalline phases (ordered solid), glass (disordered solid) and liquid (fluid). Even simple molecular substances such as small chain monohydric alcohols (methanol, ethanol, propanol ...) have phases with different types of spatiotemporal order in different degrees of freedom. Probably, the most notable example is the ethanol in which apart from the conventional crystal, glass and liquid phases, can take a orientational glass phase with translational degrees of freedom arranged in a bcc crystal while the orientational ones are in a disordered glassy phase. These orientational degrees may in turn "fuse" at a certain temperature and rotate around the molecular centers of mass ordered in the crystalline structure.

During 2009 we studied how the interplay between the molecular and collective degrees of freedom affects transport properties in condensed matter by measuring the thermal conductivity of methanol, ethanol and 1-propanol in a wide temperature range along the glass transition. From the comparison, it is clear that the orientational degrees of freedom are the most relevant in regard to the glassy behavior as well as the strong dependence of the thermal conductivity on the molecular degrees of freedom, i.e., the number of carbons or equivalently with the density of hydrogen bonds of the condensed phase. These degrees of freedom are effective

dispersers of acoustic phonons. On the other hand, in regarding the crystalline phases of these three alcohols, the conductivity deviates from the expected crystalline behavior as the temperature rises. The study of the nature of this offset points to the emergence of quasi-localized phonons beginning to be thermally populated at around 40 K.

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

In recent years much of the work in this area developed by the group has been focused on the Spanish candidature to the European Spallation Neutron Source (ESS-Bilbao). Within this respect, on May 2009 an inflexion point was reached after an informal agreement in Brussels in favor of the Swedish site proposal (Lund) and the subsequent agreement between the Spanish Science and Innovation Ministry and the relevant Swedish. As a consequence the ESS-Bilbao Consortium (Central Administration / Basque Country Government) has refocused its activities now under the direction of Prof. Javier Bermejo. More specifically, the ongoing activities are aimed at building a local infrastructure based on a high power light ion accelerator in order to provide service to advanced experimental programs not only in the production of neutron beams by nuclear fragmentation processes (spallation) but in areas as diverse as particle physics, the study of materials for nuclear fusion, unstable isotopes production for nuclear physics studies or possible applications of this kind accelerators in radiation oncology. Three are the main objectives the center:

- To serve as a center for design, development and prototyping of some acceleration structures responsible for the neutron beam energy gain up to about 2.5 GeV.
- To nucleate in our system of Science-Technology-Innovation, a laboratory specializing in science and technology of high power accelerators, comparable with those in the surrounding countries involved in the development and coordination of international large facilities.
- To provide to our industrial sectors tools to position themselves advantageously in areas requiring the use of light ion beams (high power semiconductors, aerospace industry, lithography, ultra-hard materials).

Apart from the center for accelerators, it has also started the assembly of the instrument WISH (second target station of ISIS facility) in which we are involved in several of its components and the development of an update for PEARL (first target station ISIS facility) an instrument specialized in sample environments at extreme pressures.

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.
- Rotacional energy transfer coefficients by molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of atmospheric relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.

TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, MOLPRO.
- 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.
- Theoretical and Computational methods.

RESEARCH ACTIVITIES

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research is divided in the three sub-lines indicated in more detail below.

Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems

Around 2006 we initiated the study of solid systems, analogues of astrophysical objects. Since then, we have prepared ice mixtures of water, carbon dioxide, methanol and methane, which are some of the main constituents of comet nuclei, and studied them using infrared spectroscopy and mass spectrometry. The recent addition of a new cryostat has enabled us to extend our experimental work down to 6 K covering a temperature interval very interesting in astrophysics. In the following paragraphs we describe in more detail the main contributions achieved during the last year.

We have prepared ices of mixtures of carbon dioxide and methanol in a range of temperatures relevant for star forming regions, comets, polar caps of planets and satellites, and other solar system bodies. The presence of two slightly different structures of CO₂ is put into manifest. A distorted CO₂ structure is characterized by IR bandshifts with respect to normal CO₂. By comparison to CO₂/H₂O that we studied last year, we have found that 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. The work with methanol led to another investigation, using IR spectroscopy and SIESTA calculations, in which we provided new results on the phases of solid CH₃OH, a subject which is still not fully understood.

We have started new investigations on ices of methane and water, based on recent observations of CH₄ in different astrophysical objects. We prepared co-deposited samples of CH₄ and H₂O in a wide range of stoichiometries and studied their temperature behaviour when they are warmed up to 60 K. The spectroscopic analysis is centered on the methane features, and also on the water dangling bonds that appear in the spectra of the mixtures. The IR forbidden ν_1 band shows up in the spectrum (3.44 μm), indicating some form of distorted methane. Methane adsorbed on water micropores or trapped inside the amorphous solid water structure is assumed to be responsible for these effects. Raising the temperature of the ices up to 60 K liberates part of the methane, but a fraction is retained with a maximum value of $\sim 7\pm 2\%$. This limit may provide information on the temperature properties of astrophysical objects. The different spectral characteristics of water dangling bonds in mixed samples can also furnish information to estimate the stoichiometry of the mixture.

Perhaps our most exciting result of 2009 is centered on the ammonium/water ice mixture. The 6.85 μm band observed in the spectra of young stellar objects has been recently analyzed and the most usually accepted assignment to the ν_4 bending mode of NH₄⁺ is still under debate. We have studied frozen solutions of NH₄⁺Cl⁻ in water in an astrophysical range of concentrations and temperatures, by hyperquenching of liquid droplets on a cold substrate. The ν_4 band of NH₄⁺, which is very strong in the pure crystal and in the liquid solution at ambient temperature, becomes almost blurred in IR spectra of the frozen solution. The experimental results are supported by theoretical calculations, which predict a broad range of weak ν_4 features for amorphous samples containing different ammonium environments. The present results indicate that the ammonium ion surrounded by water molecules only cannot suffice to explain this spectral feature. This paper contributes with new evidence to the discussion on the assignment of the 6.85 μm band.

In the atmospheric line of research, we have performed two theoretical investigations, one on hydrogen-bonded effects in spectra of the nitric acid dihydrate, and another one on ternary mixtures of hydrogen chloride, nitric acid and water, estimating the structure and stability of 15 possible clusters of these compounds. Both investigations may have possible relevance for polar stratospheric clouds and ozone depletion research.

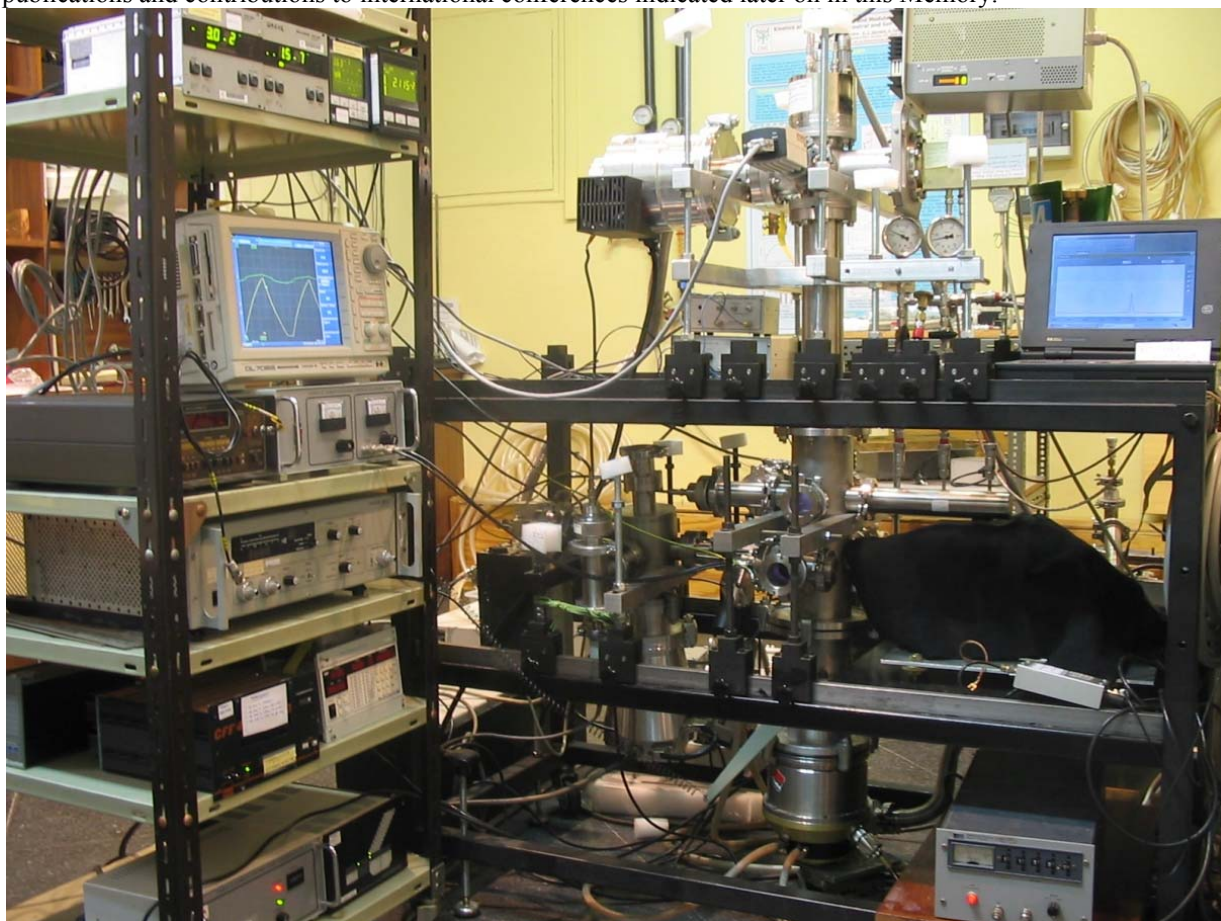
The main results of this line are reflected in six publications in 2009 as indicated later on in this Memory.

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.

During 2009, 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.

We have continued with the studies of ion energy distributions in hollow cathode discharges of different gases at low pressures. In collaboration with CIEMAT, we have investigated further 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; and in collaboration with ISOM, the growth of silicon nitride (SiN) thin films by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition has been studied. The main results are reflected in the publications and contributions to international conferences indicated later on in this Memory.



Cold plasma kinetics and studies on plasma-surface interactions.

We have started the study of the kinetics of H_2+Ar cold plasmas. These plasmas find widespread application in diverse fields of material science, where they are employed for deposition and sputtering or as particle sources. In conjunction with optical emission spectroscopy and mass spectrometric techniques, they are also widely used for elemental analysis. We have been analyzing the experimental results and comparing with a simple kinetic model,

which includes the presence of a small fraction of high energy electrons and the attenuation of the Ar^+ ions in the sheath through asymmetric charge exchange with H_2 .

Dynamics and kinetics of chemical reactions

We have extended our works on the relationship between transition state properties and dynamics to the study of ion-molecule reactions starting with the prototypical system $\text{H}^+ + \text{H}_2$, characterized by a deep well in the potential energy surface. Using the cumulative reaction probability formalism we have investigated the structure of the reaction path, where transition states can be identified. These transition states tend towards the configurations of reagents and products respectively. A statistical treatment has been found to be adequate for slow collisions, but dynamical constraints appear with increasing collision energy. Research along this line has been carried out in cooperation with our colleagues from the Universidad Complutense within the framework of our “Unidad Asociada de Química Física molecular”. In the same context, experimental research on the transition state in the photodissociation of CH_3I , using femtosecond laser and imaging techniques, has been continued.

More details about this line of research and the researchers and supporting personnel that work in it, can be found in our webpage: <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm>.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The main goal of this research line is the study of the gaseous supersonic flows in the interphase between the microscopic, essentially quantum, description, and the macroscopic one, governed by the continuous compressible fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land full of theoretical contradictions and experimental difficulties, lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods.

The theoretical tools of the Molecular Fluid Dynamics are the Schrödinger equation and the generalized Boltzmann equation and its macroscopic derivatives, the Navier-Stokes and the gas dynamics equations. Our Laboratory of Molecular Fluid Dynamics has shown that the supersonic jets of gas media are a very fruitful research topic from the experimental point of view. The study of the collisions, the basic mechanism for the energy transfer between molecules, appearing in the nucleus of the integer-differential generalized Boltzmann equation, can be afforded in these jets.

Along the last fifteen years we have built at the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics two complete instruments for the diagnostics of supersonic jets, whose performance and flexibility are unique worldwide. One of them (A) is devoted to the study of cohesive collisions, and the other one (B) to inelastic collisions.

A constant concern of our laboratory is to keep upgrading these instruments, on the basis of the cumulative experience on previous experiments and measurements, as well as on some theoretical developments. In this regard, along 2009 we have designed, jointly with the University of Frankfurt, an ambitious project aimed at producing para-hydrogen microjets undercooled below 2 K in order to study the structure of liquid molecular hydrogen, and its predicted superfluidity. Several pieces of equipment (a few microns cryogenic nozzle, liquid helium cryostat, Schlieren image system, etc.) have to be adapted to the expansion chamber of our instrument (A), and blueprints of the necessary parts have been agreed. On the other hand, we have performed several upgrades on instrument (B) towards removing the thermal disturbance on the nozzle from the exciting laser source, as well as the fitting of a 25 m^3/hour Scroll-type dry pump in order to pump pure oxygen, a gas that will be an important subject of present and future projects.

With regard to experimental measurements, we could only work along the first six months of 2009, because of the repairing works in the laboratory. On instrument (A) we have measured jets of pure para- H_2 as well as controlled mixtures with He, at stagnation pressure of 0.6–5.5 bar and temperature of 30–60 K, from nozzles of 30 and 50 micron diameter. We have recorded the Raman spectra in the rotation (354 cm^{-1}), vibration (4160 cm^{-1}), and rotation-vibration (4497 cm^{-1}) spectral regions, and new lines of the dimer and trimer have been observed, as well as the progressive transition from the liquid to the solid, characterized by the splitting of the rotational line caused by the crystal field.

On instrument (B) we have tested two new circular nozzles of 90 and 280 microns diameter, home-made the first one while the second one was based on a commercial aerograph nozzle, which has proved satisfactory. By using these nozzles we have measured series of supersonic jets of pure oxygen at stagnation pressure $p_0=100 \text{ mbar}$, 230 mbar and 10 bar, in order to start a new systematic study of $\text{O}_2:\text{O}_2$ inelastic collisions in the temperature range below 50 K. With the new dry vacuum pump we are able to measure good quality data up to 33 nozzle diameters,

but the onset of the normal shock wave due to a lack of pumping speed poses a translational temperature lower limit of ~ 10 K. Thus, we are considering to instal a second scroll pump and a differential pumping system.

With regard to data interpretation, a detailed análisis of the many jets of pure para- H_2 recorded with instrument (A) at stagnation temperatures of 27–103 K has been carried out, allowing us to study the cohesive collisions between para- H_2 molecules in the jet at kinetic temperatures from 20 to 0.2 K. This rich data set has been used to obtain the rate coefficients for dimer and trimer formation, the first quantitative interpretation of the beginning of molecular clustering with time resolution.

The analysis of the data on the $\text{O}_2:\text{O}_2$ inelastic collisions obtained with the instrument (B) yielded some surprise which will force to revise a number of well established concepts in the literature (nevertheless erroneous) on supersonic gas jets. The main one is that the assumed isentropic hypothesis is far from being a good approximation: our data indicate that the jet departs more from isentropic behaviour for lower stagnation pressure (i.e., lower Reynolds No at the source). This has important consequences on the right estimation of the translational temperature along the jet, and on the accurate determination of the state-to-state rate coefficients for inelastic collisions. Once the appropriate corrections are introduced, the ab initio calculated rate coefficients for $\text{O}_2:\text{O}_2$ by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics at the Instituto de Física Fundamental (IFF-CSIC) turned out to agree well with the experiment. This result opens a promising landscape for cooperation between theory and experiment, which hopefully will improve our understanding of the inelastic collisions at very low temperature, and will allow us to assess the quality of the intermolecular potential energy surfaces used in the calculations.

Finally, on the methodology section it is worth mentioning the development of a new data reduction procedure for the fluid dynamic quantities in supersonic jets, with a robust statistical treatment, as well as the writing of a number of FORTRAN programs for the numerical calculation of such quantities and their implementation into the Master Equation responsible for population evolution.

LASER SPECTROSCOPY

The work of setting up a new experimental technique in order to measure rotational energy transfer rates by collisions in gas phase molecules at low densities has been completed, and the newly developed technique has then been demonstrated by applying it to the measurement of these transfer rates in the $\text{C}_2\text{H}_2\text{-C}_2\text{H}_2$ molecular system at 155 K.

The experimental configuration consists of an initial step in which a vibrationally excited state (in this case, $v_2=1$) is prepared through a stimulated Raman pumping process that populates a single rotational state. Immediately after this excitation, a second stage follows in which a stimulated Raman spectroscopy setup is used to monitor the evolution of the rotational populations in $v_2=1$ by registering the evolution of the $v_2=2 \leftarrow v_2=1$ spectrum as a function of density and/or time. In order to be able to closely follow this evolution, a variable synchronization setup between the laser pulses of the pump and probe stages had to be developed, as well as a data acquisition system that could measure the delay between the two stages with a precision better than 1 ns despite the temporal jitter between the laser pulses being of the order of 2 ns. Additionally, as part of the effort to improve the temporal resolution of the technique, a pulse compresor based on a stimulated Brillouin cell has been built that can reduce the temporal width of one of the pump pulses from 12 to 1 ns, thus allowing a significant increase in the temporal resolution achievable with the technique.

It is worth mentioning that this technique, unlike others that have been proposed through the years, allows the normalization of the measured signals in order to compensate for the reduction in the populations due to vibrational relaxation and to diffusive runaway of the excited molecules out of the region under observation. These two processes can result in a significant reduction of the measured rotational populations, especially at long delays.

The application of the technique to the acetylene system has rendered a total of 2750 collected data corresponding to pump/probe delays between 6 and 30 ns. This large set of data has allowed the determination of 28 collisional transfer rate constants without the use of any approximations other than the sum rule and the detailed balance condition. When scaling laws are also used, the number of rate constants that can be determined rises to 55. These data correspond to all the rotational states of ortho-acetylene from $J=1$ to $J=21$, in which 99.5% of the rotational population resides at the temperature the experiment was carried out.

In a different line of work, the high resolution Raman spectrum of the $2\nu_{10}$ band of C_2H_4 , registered in Madrid, has been analyzed in cooperation with the University of Bourgogne through the application of the tensorial formalism for assymmetric top molecules developed in this university. A total of 191 spectral lines were assigned and fitted without the need to include perturbative effects -such as Coriolis or Fermi resonances- in the model, obtaining a

mean square deviation of $8.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. The tensorial formalism, which was already well tested and established for symmetric top molecules, has thus been satisfactorily tested for the case of an asymmetric top.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have carried out the study of long lasting alignment of a diatomic molecule under the effect of a train of non-resonant ultrashort laser pulses. This alignment can be converted to orientation by the effect of rather weak static fields.

We have determined the conditions under which the adiabatic modification of a parameter in the Floquet Hamiltonian gives rise to adiabatic evolution of an initial rotational eigenstate towards a strongly oriented cyclic state. 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. The method has proved to be useful for a big range of molecules under experimentally accessible conditions.

We have extended the previous work to higher energy rotational cyclic states for which the molecular orientation oscillates between maximum orientation and antiorientation at some integer multiple of the fundamental frequency of the pulse train, which can be easily tuned. Again, the main problem is the quasi-energy crossings of the Floquet Hamiltonian. Preliminary results are promising. We have carried out a detailed analysis about the existence and survival probability of approximate cyclic states for a time-periodic Hamiltonian, that are obtained as projections in the rotational basis of eigenstates of the corresponding Floquet Hamiltonian, for the case of unbounded H_0 and a truncated spatial and time basis. Our results show that cyclic behavior can be maintained for millions of cycles of the perturbation for reasonable experimental conditions. We have carried out 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. We have included explicitly the effect of the long range dipole interaction on the translational Hamiltonian.

Ultracold quantum gases

A new research line on ultracold quantum gases has been opened in the department with the incorporation of the new Ramon y Cajal fellow.

We have focused our study in a system of bosonic atoms trapped in an optical lattice with a disorder potential and in the presence of a constant force oscillating in time. In the regime of fast oscillations, we have shown that one can induce transitions between the different exotic quantum phases of the system. In addition, we are analyzing the possibility of generating useful momentum, able to move the atoms in the lattice potential, with this kind of oscillatory potential.

In collaboration with the Institute of Photonic Sciences of Barcelona we have analysed the counting distributions of ultracold atoms initially trapped in an optical lattice in a detector located far away from the trap. The expansion of the atoms in the gravitational field yields correlations between the original atomic modes which can be registered at the detectors. Different initial trapped states can be distinguished by looking at the counting probability distributions.

Analysis of Spectra

We have analyzed the line-shape of high resolution Inverse Raman Spectra in the near nozzle region of a supersonic jet of pure N_2 and mixtures with noble gases. Spectra taken very close to the nozzle show a highly anomalous spectral profile with two sharp asymmetric peaks over a broad Lorentzian like part. High resolution, both spatial and spectral, along with the high degree of control over the lasers spatial profile has allowed a rather detailed analysis of density, temperature and velocity distributions in the expansion. This has allowed us to refine aspects of the standard models for a supersonic expansion.

2B.4 MOLECULAR AND INFRARED ASTROPHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINE:

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

- Theoretical Chemistry.

RESEARCH SUB-LINES:

- 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:

- Optical and near-IR Integral Field Spectroscopy.
- Optical and Infrared Imaging.
- Scientific Satellites and Telescopes.
- Theoretical molecular physics.
- Computational methods.
- High level ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITIES:

The research activities of the group during 2009 have been focussed in 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 2009 we have finished 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 University of Oxford (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. In the framework of this project, several studies have been performed with the company SENER, and a Letter of Agreement has been signed with the University of Oxford, UK.

DAMIR continues its participation in the mid-infrared instrument (MIRI) and the near-infrared spectrograph (NIRSpec) for the *James Webb Space Telescope* (JWST). During 2009, the group has been involved with all activities of the MIRI Test Team, and coordinating the group "High-z Universe". As for NIRSpec, the activities in the frame of NIST (NIRSpec Instrument Science Team) have continued during 2009.

LIRGs, ULIRGs AND AGNs 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 (Alonso Herrero, Colina).

A. Alonso Herrero in collaboration with researchers at the University of Arizona mid-infrared mapping with the *Spitzer* IRS of 14 local LIRGs has been awarded. Miguel Pereira Santaella continues 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.

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 awarded observations in Cycle AO-7. The observations were taken 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, 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 will be taken in summer 2010.

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 has 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 have 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 continues his PhD work where he will be investigating 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.

LIRGs, 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 University of Arizona, 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 how to 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.

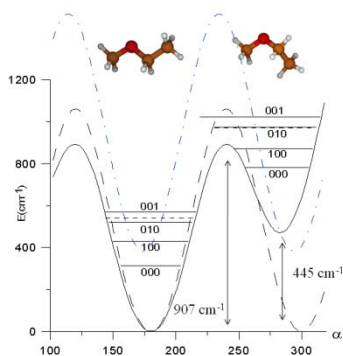
Recently, more than 150 different molecular species which size varies from the diatomics to the *fullerenes* and *PAHs*, have been detected. In this search, the theoretical molecular physics can play a very important role because the astrophysical clouds are incessant sources of new species existing 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 for predicting very accurate structures and properties, electronic states, reactivity and formation processes. In the case of unstable species unable of been treated in a laboratory, theoretical methods represent decisive tools for research. In cases they can be experimentally treated, the theoretical methods are usefull for understanding the properties, for correlating them to the molecular structure and to verify assignments.

Our contribution to the science preparation projects of the future instruments is performed within of European networks as is "Molecular Universe" and in collaboration with the AYA2005-00446 y 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 technique 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, which programmers are helping us. Furthermore, we developed our own codes (FIT-ESPEC, ENEDIM) for determining observable properties from the PESs. During the last years, we have done a huge effort for programming codes which allow us to study systems of major complexity. Many astrophysical species are not well characterized because their instability difficults 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 the large molecule formation processes. In addition, there are species as ethyl-methyl-ether that are well define but presents incoherencies in the molecular base data for some concrete properties. In this case, calculations are useful for understanding the source of the problems and for discussing assignments. I should be considered that ab initio methods are usually more sophisticated than those employed by the experimentalist.



FIR spectrum of the etil-metil-eter (Senent et al. , J.Chem.Phys)

b) Determination of line intensities from the 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 Walls 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, SO₂ and C₃ in collision with con He e H_2 . Our results are always collected in 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 initiated studies of reactions involving many isomers and electronic states for carbon chains (C_4+H) or for species of atmospherical relevance (Mg^++O_2). We predict conical intersections, spin-orbit effects ans possible reaction channels.

2B.5 VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Chemical-Physics of Deposition and Ablation Processes.
- Biospectroscopy.
- Surface Spectroscopies.

- Surface Plasmon Photonics.

RESEARCH SUBLINES:

- Ablation induced by IR Laser Radiation.
- 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.

EMPLOYED 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 WORK:

-
- STUDY OF IR LASER INDUCED ABLATION

We are carrying out ablation process studies in several systems:

- SiO pellets
- Biological Tissue Films (gelatines)
- TiO₂ pellets.

In collaboration with the Laser Chemistry Group of the Chemical-Physics Institute, Rocasolano, we have followed with the study of the ablation of SiO targets, subject in which we collaborate since several years. Now, laser-induced fluorescence is used to investigate the formation mechanisms and stability of cationic and neutral silicon oxide clusters by means a UV laser at 266 nm.

Other subject in which we collaborate with the same group is 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. We have obtained the ablation thresholds for the CO₂ laser irradiation in Gelatine B225, Chitosan and Chitosan plus PVC samples. Regarding to the morphological changes induced by the CO₂ laser irradiation, we have observed that, while in Gelatine B225 the formation of different sized bubbles is predominant, in Chitosan and Chitosan plus PVP the formation of ripples with a high degree of ordering is prevalent.

Finally, we collaborate also with the same group in the study of the ablation processes of TiO₂ pellets in the Anatase phase or in the Rutile phase obtained by sinterization of Anatase. By Using Raman spectroscopy we have checked that TiO₂ Anatase phase irradiated by CO₂ laser transforms to Rutile phase for laser fluences larger than 5 J/cm². In the case of TiO₂ Rutile phase the irradiation with high fluence infrared laser radiation gives rise to shifts and widening of the Raman bands similar to the effect observed in the Rutile samples thermally treated.

-
- LASER INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY, LIBS

We have followed the collaboration with Prof. J.J. Camacho of the Physical-Chemistry Department of the Autonomous University of Madrid by synchronizing the CO₂ laser and the ICCD camera in order to be able of carrying out dynamical studies of the LIBS processes. This has allowed to investigate by time-resolved optical-emission spectroscopy the ionic and neutral species formed in LIBS of gaseous Nitrogen, Oxygen, CO₂ and ambient Air and the ionic and neutral species formed in the ablation of Graphite and Germane targets. The results show, in general, a faster decay of the ionic spectral species than of the neutral atomic and molecular ones. In all the cases the velocities and kinetic energy distributions of the different formed species have been obtained.

Also, in some cases, the temporal evolution of the electron density has been used for the estimation of the three-body recombination rate constant.

Besides, we have reviewed all the results we have obtained so far in LIBS for publication in Books of general interest about Laser Applications and Laser Spectroscopy. So we have published the chapters: "Optical Breakdowns in Gases Induced by High-Power IR CO₂ Laser Pulses" in "Laser Beams: Theory, Properties and Applications" (Chapter 13, 86 pp) and "Spectroscopic Analysis of Chemical Species in Carbon Plasmas Induced by High-Power IR CO₂ Laser" in "Applied Physics in the 21st Century" (Chapter 2, 50 pp).

TWO-DIMENSIONAL CORRELATION INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

In the framework of this research subline we have used infrared spectroscopy and transmission electron microscopy for the structural study of viral nucleocapsid-like particles (NLPs) consisting of HCV-120 core protein and the III_d loop of the HCV viral genome having the sequence 5'-UAGCCGAGUAGUGUUGGGUCGCGAAAGGCUU-3'. The assembly reactions have been carried out at 4°C on ZnSe windows for infrared spectroscopy in order to get NLPs and measure their H/D exchange spectra for subsequent analysis by two-dimensional correlation spectroscopy. On the basis of the spectra from the two NLPs components, the most relevant structural changes upon formation of NLPs can be described as follows. a) The HCVc-120 protein is β -sheet enriched and interacts with the viral RNA mainly through arginine-phosphate and arginine-guanine bonds; and b) the NLPs are solvent permeable as shown the H/D exchange kinetics. Arginine-guanine interactions are also supported by ultraviolet spectroscopy measurements using assembly reactions between the HCVc-120 protein and various model synthetic oligonucleotides.

STRUCTURE OF BIOLOGICAL SYSTEMS IN FOOD

In collaboration with Instituto del Frío (CSIC) we have carried out a study on the applicability of infrared spectroscopy (FT-IR) for probing of lipids and protein structural changes and their possible interactions in the formation of various oil-in-water emulsions. Two different emulsions were prepared using sodium caseinate, as stabilizer system, without and with microbial transglutaminase (MTG), referred to as E/SC and E/SC+MTG respectively. Proximate composition, fat and water binding properties and textural characteristics were also evaluated in the emulsions. Penetration force and gel strength values were used to distinguish different ($P < 0.05$) textural behaviours depending on the formulation of emulsifying system. E/SC+MTG emulsion showed gel textural behaviour while E/SC lack of this property. The spectral results showed frequency upshifting of the amide I band in going from protein stabilizer systems isolate (the solution used as reference) to their corresponding emulsions, what is attributable to greater protein structural order upon emulsion formation. Enzymatic action of MTG in the sodium caseinate stabilizing system induces greater structural changes, in terms of lipid chain disorder or lipid-protein interactions and protein secondary modifications, which may reflect the formation of a gel structure in the emulsion. These results could help to choose the stabilizing system that is most suitable and effective for its use in the formulation of food products.

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 resonant) 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, and the modification of metal electrodes.

Laser photoreduction by radiolysis was developed in the last years in our laboratory for the in-situ trace analysis of molecules of different nature. It was developed a method 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 analysis of flavonoids on silk and wool.

Another researching line on interest was the preparation of bimetallic core/shell nanoparticles. The methods assayed in this year were the fabrication of Ag/Au and Pt/Au by reduction of Ag and Pt on Au NPs. The resulting systems were characterized by Plasmon resonance and microscopy (TEM, SEM and EFM) as well as SERS spectroscopy. This permitted to evaluate the effectiveness of the coating method, as well as the metal distribution in the metal nanoparticles. In this sense, a new researching line was opened consisting of the fabrication of core/shell nanoparticles where the core was integrated by a magnetic material and the shell was a plasmonic metal, thus combining the magnetic and plasmonic properties in the same nanoparticle.

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 cyclooligomers 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 calix [4] arene 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 occur 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 have 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 researching line consisting on the application of SERS spectroscopy in the analysis and detection of sport doping drugs (SDD) was implemented. This new line was inspired 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 demands imposed by the new legislation (Ley Orgánica 7/2006, November the 21st). 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 health of the persons. In particular 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.

The 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 lead 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 on the study of the degradation of mortars and concretes by the formation of thaumasite and generation of calcium carbonate on metallic electrodes.

NANOANTENNA ENHANCED FLUORESCENCE

We have extended the fruitful theoretical and numerical ongoing research on light scattering and plasmon resonance excitation on metal nanostructures called nanoantennas, as a joint venture with Dr. Jaime Gómez Rivas and colleagues at the *FOM-Institute AMOLF (Amsterdam)* and *Philips Research Labs (Eindhoven)*. In particular, optical emission close to rectangular with plasmon resonances has been characterized, with special emphasis on the dependence on position and polarization of the transition dipole (associated to the single molecule) of the fluorescence enhancement at nanometer distance from such nanoantennas. To that end, calculations have been carried out to determine *scattering* spectra of the optically coupled nanodimers, along with the radiative and non-radiative decay rates (and quantum efficiency) of a single molecule placed in the nanodimer gap at nanometer distances. It is shown that the molecule-nanoantenna coupling is extremely selective, stemming from the peculiar distribution of the local density of electromagnetic states of the nanoantenna, giving rise to huge enhancements (without dissipative quenching), but also to strong non-dissipative quenching. Moreover, the angular pattern of the resulting emission are governed by the nanodimer resonance rather than by the dipolar pattern of the fluorescent molecule itself, which further confirms the strong coupling between both.

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 and elongational processes in polyolefin blends.
- Molecular dynamics and dielectric properties.
- Structure-dynamics -relationships in soft and polymeric condensed matter.
- Tridimensional electron microscopy: Structural study of biological macromolecules.
- 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.
- Raman Spectroscopy.
- Micro and nano hardness.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion.
- Capilar extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and multi angle laser light scattering (MALLS) at high temperatures.
- Dynamic light scattering (DLS).

RESEARCH ACTIVITY

SIMULATION OF CB1 AND CB2 CANNABINOID RECEPTORS

Multinano-second molecular dynamics simulations have been performed on systems composed by the cannabinoid receptor embedded in a lipid bilayer. Cannabinoid receptors are transmembrane proteins whose function is developed in a biomembrane. It is necessary then to take into account the mutual interaction of protein and lipid bilayer, as a precursor of an actual biomembrane. The simulations performed with both receptors show, effectively, a differential behaviour when the proteins are associated to the lipid bilayer. In fact, these results confirm that CB2 exerts a different distortion extent on the lipid bilayer, in agreement with the experimental observations locating each protein in different lipid environments.

STRUCTURAL STUDY AND CONFORMATIONAL ANALYSIS OF PROTEIC UNITS

The protein folding process is one of the most important events in biophysics. Protein folding is known as the complex process by which a polypeptide chain reaches its native three dimensional configuration. At the end, the protein structure is unequivocally determined by the nature of each amino acid and its position in the sequence that constitute the protein. In this sense, the study of the conformational space associated to each amino acid and the conversion kinetic between stable conformational states, will shed light on the protein folding process. A way to cope with the conformational analysis is the calculation of free energy maps associated to both ϕ and ψ torsion angles of the peptide chain. These maps can be generated by molecular dynamics simulation on elementary subunits of the protein structure as di and tri-peptides. Building these maps requires to perform many simulations, so we are using distributed computing technologies that are being implemented at CSIC. For example, GEMPPPO started one year ago an initiative called "Neurosim" as part of the Ibercivis Citizen Computing Platform.

NEW CATALYSTS BASED ON NICKEL FOR OLEFIN AND METACRYLATE COPOLYMERIZATION

Recently, Campora's research group of the "Instituto de Investigaciones Químicas del CSIC" in Seville has synthesized several organometallic compounds based on the nickel 2-iminopyridine-N-oxide moiety (PymNox catalysts) as an alternative to the neutral systems based on salicylaldimine ligand proposed by Prof. Grubbs to produce ethylene (E) and metacrylate (MA) random copolymers. The PymNox catalysts present some advantages due to its cationic nature and are expected to have higher activity and stability to polar monomers than the neutral counterparts. At a first sight, the experimental results of the copolymerization are not sufficient to explain the behavior of the different PymNox catalysts respect to the incorporation of MA. In particular, the aldimine PymNox (Ni2) is not able to incorporate MA whereas the acetaldimine PymNox (Ni1) analogue is able to insert this polar monomer. Our research group has performed a series of theoretical studies by calculating the reactivity profiles of both catalysts, confirming that only Ni1 might incorporate MA. We explain the unlike reactivity for Ni1 and Ni2 as a steric effect of the "extra" methyl group present in the Ni1 with the aryl bulky groups linked to the 2-iminopyridine-N-oxide ligand. This steric distortion favors the pi-coordination of the MA monomer and the subsequent insertion into the growing polymer chain over the sigma-O bound of the MA poisoning (deactivating) the catalyst. On the contrary, the sigma-O bound is favorable respect the pi-coordination of MA, not being possible the incorporation of MA in the growing polymer chain. These new theoretical results encouraged to the experimental groups to perform new experiments which completely agree with the theoretical interpretations.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF THE FOLDING PROCESSES OF LONG-CHAIN ALKANES

Molecular dynamics are being performed in the NPT ensemble using a box simulation with 500 carbon linear chains of 246 carbons each one. This system is representative of the long-chain alkanes which are able to form folds as the temperature decreases. Furthermore, we this system is appropriated to validate the simulations due to the existence of experimental results in melt and in dilute solution. The scheme to perform the simulations is sketched in the following lines. Firstly, we equilibrate the system at a high temperature of 600K for 4 ns, subsequently the temperature is decreased in steps of 4 ns by 25K until a T=450K is reached. In our studies three different potentials have been used. Among the potentials used are the PYS that can be considered a realistic potential; the Muthukumar's potential, which introduces a fictitious stiffness in the system to speed up the formation of folding; and finally the Gee's potential that can be considered as a potential to introduce some rigidity but not as fictitious as that of Muthukumar one. The simulations have been performed on different supercomputers (Magerit of the CESVIMA-UPM and FINISTERRAE in CESGA), using 64 processors for each simulation. After analyzing the results, we see that the Muthukumar potential is too rigid and will not use it in subsequent calculations. However, the Gee potential speeds up the folding process in a less artificial way. For the PYS potential at a temperature of 300K ordering of the chains has not been observed within the simulation time, thus a much longer dynamics is needed. However, for the case of Muthukumar, we can appreciate some order of the chains at a temperature of 450K, because as stated above, is a potential that favors the folding and clustering of stems. In the case of Gee potential, for the first 10 ns at 450K some folded structures (less that in the case of Muthukumar) are observed.

THE EFFECT OF SHORT CHAIN BRANCHING IN THE ENTANGLEMENT STATE OF POLYETHYLENE: SIMULATION AND EXPERIMENTS

We have performed full atomistic computer simulations of the molecular dimensions and dynamics in the melt of entangled linear and short chain branched polyethylene chains. This has been achieved by using a number of equilibrated molecules in all length scales by advanced Monte Carlo moves. This strategy allows evaluating the density and the intermolecular local packing (chain size) in the melt by mapping of the Monte Carlo atomistic simulations on the packing length model. Furthermore, a complete description of the molecular dynamics in a broad time range is also possible. The results obtained can be summarized as follows: **(i)** a close agreement between the simulated and experimental chain dimensions measured in dilute solution and in the melt has been found; **(ii)** the simulated chain dimensions account for a dilated tube diameter as the amount of short branches increases, in agreement with the entanglement features obtained from rheological experiments; **(iii)** the time evolution of the mean-square inner segments displacement is in quantitative agreement with the experimental results obtained by incoherent neutron spin echo experiments for monodisperse polyethylene samples with similar molecular architecture; and **(iv)** a slowing down of the chain dynamics as the amount of short chain branches increases is predicted, characterized by a sharp increase of the equilibration relaxation time and a decrease of the Rouse segmental rate. Both, the simulations and the experiments, illustrate the dependence of the chain dimensions, the entanglement features, and the characteristic relaxation time of the transition with the molecular architecture of polyethylene for short chain branching content between 0 and 55 per 1000 carbon atoms.

VISUALIZATION AND RECONSTRUCTION OF THE 3D STRUCTURE OF PROTEINS

Along the last year we have set in at the IEM a new transmission electron microscope. In this context we have deal with the problem of the determination of the 3D structure of biological complexes, by means of image reconstruction techniques. We have started to work with negatively stained specimens of the chaperone **GroEL**, a protein folding-aid functional eucariothic complex. The complete set in of the technique will eventually allow the study of vitrified complexes in their native state. Also the STEM has been presented to the User's Group, formed by the groups of the IEM with interest in transmission electron microscopy.

PHYSICAL PROPERTIES OF POLYOLEFINS: CATALYST STRUCTURE AND MOLECULAR TOPOLOGY

It is found that the presence of hydrogen during polymerization with post-metallocene iron catalysts causes a systematic increase in the molecular weight and polydispersity index of the products. This result is in agreement with recent computer simulations studies about the ability of this type of catalysts for ethylene polymerization. In view of the simulations, Fe(III) active species yield low molecular weight polymers whereas Fe(II) active species produce a high molecular weight fraction. In combination with experimental results, it could be suggested a conversion of Fe(III) to Fe(II), which might be accelerated by the presence of molecular hydrogen. Interestingly, a

strong effect of the high molecular weight tail has been detected in the microstructure and the melt linear viscoelastic response of the samples. In this last case, the application of the double reptation mixing rule perfectly matches the experimental results, without using any adjustable parameter, and explains the effect of the high end of the molecular weight distribution.

POLYOLEFIN/NANOTUBES COMPOSITES AND POLYOLEFIN MOLECULAR MODELS: NANOSTRUCTURE AND PROPERTIES

We have studied the properties and nanostructure of molecular models and polymer/nanocomposite systems based on polyolefins, in order to establish the effect of processing in the developed structure. The composites are characterized by lower values of the viscosity and the shear modulus than the pure polyethylene, a behaviour attributed to a selective adsorption of the highest molecular weight fraction of the polymer to the carbon nanotubes. Then it is expected a different morphology in the final structure of the systems, as the orientational effect are greatly affected by the high molecular weight (high relaxation time) species. On the other hand, model amorphous copolymers of ethylene and polar monomers show a very high dimensional stability than those expected for an amorphous polymer above the glass transition temperature, due to the very high molecular weight, causing high viscosity and moduli values.

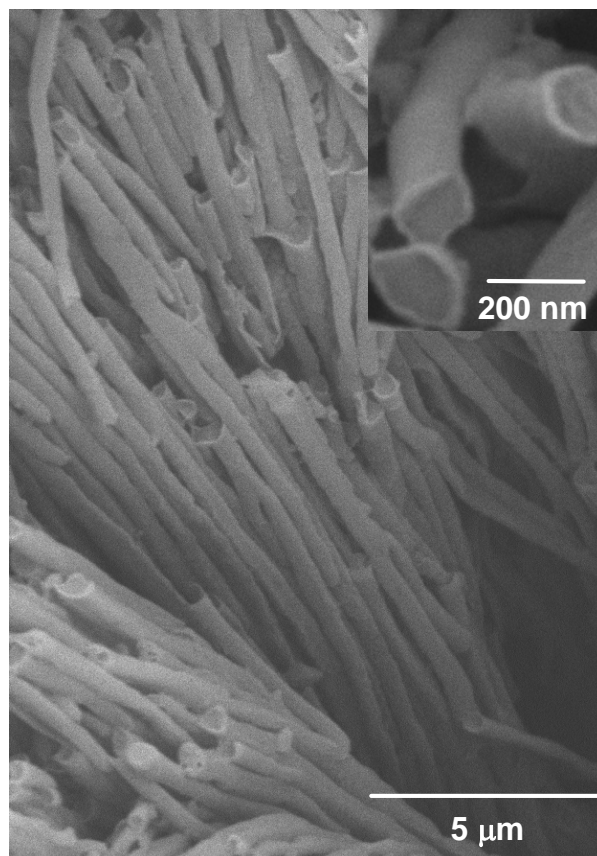
COLABORATION WITH THE INDUSTRY: NEW MATERIALS WITH END-USE SPECIFIC PROPERTIES

We have continued our collaboration with the industry in the sector of polymeric materials. 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. One of the students has just completed the PhD Thesis in one of these projects.

CONFINED DYNAMICS IN SOFT CONDENSED MATTER

Macromolecules under confinement at a nanometer scale (similar to the size of molecules themselves) exhibit nontrivial 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.



SEM images of PVDF nanostructures prepared by solution template wetting: side and top (inset) views showing the nanorod morphology when the alumina template has been removed.

PHASE BEHAVIOUR AND DYNAMICS IN DIBLOCK COPOLYMERS

The phase behavior of diblock copolymers is studied by SAXS and differential scanning calorimetry. The ordering transition temperatures and the lattice structures of the segregated domains have been estimated by means of SAXS measurements. Poly(styrene) and poly(ethylene methacrylate) diblock copolymer is in the weak segregation limit, while diblock copolymers based on poly(styrene) and poly(dimethyl siloxane) are in the strong segregation limit. For the PS-*b*-PEMA, the unmixing of the blocks into a lamellar morphology takes place during heating. Fine control of the inter-layers thickness in the ordered phase is achieved by annealing with time-temperature dependence above the LCOT. Broadband dielectric spectroscopy has been used to study selectively the dynamics of the poly(ethyl methacrylate) chains in both mixed and phase separated PS-*b*-PEMA copolymers. Compared with a poly(ethylene methacrylate) homopolymer, the α relaxation describing the segmental dynamics shows slower relaxation times and changes in the apparent activation energy (dynamic fragility). PS-*b*-PDMS copolymers have been investigated as a function of the comonomer composition. Lamellar, cylindrical and spherical structures are found, opening an elegant route to investigate the confined dynamic of the segregated phases as a function of thickness and geometry.

STRUCTURE DYNAMICS RELATIONSHIPS IN SOFT CONDENSED MATTER

We have continued with the experimental research line designed to obtain both structural information by elastic X-ray and neutron 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 changes in the dynamics during disorder to order phase transition in primary alcohols like ethanol in a broad spectrum of frequencies. The results have helped to understand the mechanism of crystallization and its influence on the dynamics of the disordered molecules. 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. Polymer composites based on polyamide 6,6 (PA66) and different amounts of carbon nanofiber (GANF), supplied by Antolin Ingeniería S.A., have been prepared. For this, we have used three different mixing processes: melt compounding, in-situ polymerization and solvent-aided mixing. The materials have been characterized morphologically (light microscopy, SEM) and their thermal (DSC) and electrical (dielectric spectroscopy) properties have been determined. From preliminary analysis of the results, we conclude that solvent-aided mixing yields materials with good dispersion and suitable electrical properties for applications such as electrostatic dissipation, electromagnetic shielding and electrostatic painting. When the polymerization in situ is carried out, the load is well dispersed in the matrix and the data indicate that the percolation threshold has been achieved. However, the materials show lower conductivity than those composites prepared by solvent-aided mixing. Finally, melt compounding yields materials with poor dispersion of nanofibers in the matrix and, in addition, all of them show conductivity values corresponding to insulating materials. This fact can be explained if we consider that the nanofibers are broken during the mixing process and as result, the aspect ratio decreases.

BIOPHYSICS: CONFORMATION OF THE MEMBRANE PROTEIN INTEGRINE $\alpha_{2\beta}$ β_{III}

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, we have continued with experiments to obtain information on the conformations of the integrin $\alpha_{2\beta}$ β_{III} complex 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.

SAXS STUDY ON THE CRYSTALLIZATION OF PET UNDER PHYSICAL CONFINEMENT IN PET/PC MULTILAYERED FILMS.

The development of the crystalline structure of poly(ethylene terephthalate) in multilayered films of poly(ethylene terephthalate)/polycarbonate (PET/PC) was studied. Films were prepared by the layer multiplying coextrusion process in the laboratory of Prof. E. Baer and Prof. A. Hiltner from Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio, USA). Small angle X-ray scattering (SAXS) patterns were recorded during isothermal crystallization experiments. At 117°C, it was shown that the induction period increases, while the crystallization rate slows down with increasing degree of physical confinement of PET. On the contrary, the nucleation behaviour is similar for all the investigated samples and consequently, it is independent of PET layer thickness. The analysis of the SAXS curves by means of the Ruland's interface distribution function and a dual lamellar stack model shows that the lamellar stack of PET consists on an average of 3 or 4 correlated crystals. Structural parameters describing the thickness distribution of crystalline, l_c , and amorphous phases, l_a , of the lamellar system were determined. As expected, l_a decreases while l_c increases during crystallization. When this process comes to an end, those values are nearly the same for the confined and non-confined PET, which indicates that the formed PET crystals are very similar independently of layer thickness. Finally, the linear crystallinity is found to be much higher than the total degree of crystallinity obtained by wide angle X-ray experiments (WAXS). This means that not all the volume of the PET is occupied with stacks of crystals but these stacks are separated by large amorphous zones in agreement with earlier findings in non-confined PET.

NANOSTRUCTURE DEVELOPMENT IN POLYMERS BY MEANS OF INDENTATION HARDNESS: FROM THE GLASSY STATE TO MORE ORDERED STRUCTURES

A review study was undertaken covering the understanding of the nanostructure development in glassy and semicrystalline polymers as revealed by indentation hardness methods. The starting point emphasizes the influence of thermal history and physical ageing on the microhardness of polymer glasses. The correlation between hardness and glass transition temperature T_g is brought in. The assumption that microhardness approaches zero for amorphous materials above T_g is experimentally confirmed. A discussion on the influence of filler structure on the microhardness of polymer glasses is introduced. Indentation hardness is presented as a valuable tool to study the kinetics of crystallization from the glassy state and distinct results on polymer systems under different confinement conditions are shown. The nanostructure–microindentation hardness correlation in the case of semicrystalline polymers and the influence of degree of crystallinity and crystal thickness for various flexible and semirigid polymer systems are recalled. Experimental results show that for polymers with low degree of crystallinity and T_g

below room temperature, a large deviation from the microhardness additivity law is always found. This is due to a different deformation mechanism with respect to that envisaged for polymer materials with T_g above room temperature. In the case of an oriented material, indentation hardness is capable of detecting the gradual appearance of phases of intermediate order.

A COMPREHENSIVE UNDERSTANDING OF THE SEGMENTAL MOBILITY IN POLYMERS UPON CRYSTALLIZATION

A statistical mechanical model is used to analyze literature data regarding the restricted segmental dynamics of a number of crystallized polymers, as observed by means of broadband dielectric spectroscopy. A relationship between well defined physical quantities and the width parameter in the Havriliak-Negami representation of symmetric processes is established. It is found that, for materials crystallized from an isotropic amorphous state, the segmental relaxation process is associated to conformational changes within the cooperatively rearranging regions of ~ 1 nm diameter. In case of chain orientation, the dimension of the rearranging regions along the chain direction increases up to 3 – 5 nm. It is argued that the average size of the rearranging regions may influence the thickness of the amorphous interlamellar layers in the stacks. Finally, an attempt towards the formalization of a thermodynamic criterion for crystallization arrest is given.

MECHANICAL PROPERTIES AND NANOSTRUCTURE OF CLAY REINFORCED NANOCOMPOSITES

The mechanical properties and cold draw-induced micro and nanostructure of polyvinyl chloride (PVC)-bentonite nanocomposites have been investigated. Moulded sheets with 5 wt % concentration of bentonite and two processing additives were melt extruded and two-roll-milled processed. The flame retardant promoted polymer intercalation whereas a pigment dispersant promoted clay exfoliation and the polymer matrix showed isotropic orientation. The intercalated nanocomposite showed nanoplates oriented with their planes parallel to the moulded sheet surface and the Young's modulus and yield stress were significantly enhanced relative to neat PVC. The strain at fracture ($\sim 144\%$) was slightly reduced relative to neat PVC ($\sim 167\%$). The cold drawing process induced molecular orientation along the tensile axis and preserved the orientation of the intercalated nanoclays. The fracture mechanism, as investigated via scanning electron microscopy (SEM) showed plastic fracture mechanism (similar to neat PVC). On the other hand, the exfoliated nanocomposite did not show any improvement in mechanical properties but rather a limited strain at fracture ($\sim 44\%$). The fractured region, as examined by SEM, exhibited microvoid morphology. Analysis of the fractured region showed PVC macromolecules oriented along the tensile axis but no preferred orientation of the nanoclays. Then, the limited strain at fracture exhibited appears to be associated with the initially randomly oriented nanoclays being unable to orient under the tensile deformation. The nanoclays would then act as stress concentrators and lead to rapid material's failure due to loss of adhesion with the polymer matrix. The results suggest that exfoliated nanoclays could play a detrimental role when the nanocomposite is subjected to large deformations at temperatures well within the glassy regime.

STRUCTURE AND PROPERTIES OF ISOTACTIC POLYPROPYLENE MODIFIED BY CHEMICAL CROSSLINKING

In collaboration with other research groups, we have continued our previous work, dealing with the characterization of samples of isotactic polypropylene (iPP) reversibly crosslinked by chemical agents. The crosslinking method has been developed and patented by the Dr. S. Bouhelal, from the Sétif University (Algeria). The modified iPP has been characterized by dynamic mechanical thermal analysis (DMTA), differential scanning calorimetry (DSC), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and nuclear magnetic resonance (^{13}C solid state NMR). The analysis of the results obtained by the different techniques confirms the generation of ethylenic chains in a certain proportion during the crosslinking process. The improved impact strength exhibited by the crosslinked iPP is attributed to the amorphous component of the polyethylene newly generated.

STRUCTURE AND PROPERTIES OF REVERSIBLY CROSSLINKED ISOTACTIC POLYPROPYLENE/CLAY NANOCOMPOSITES

This is an extension of our previous line of research. We have investigated a series of reversibly crosslinked isotactic polypropylene/clay nanocomposites, prepared according to a new method developed and patented by the Dr. S. Bouhelal, from the Sétif University (Algeria). In this way, it is possible to obtain nanocomposites with clay contents up to 50 %. The results obtained in the characterization of these samples by small-angle X-ray diffraction (SAXD) complement the previous study, and indicate that, in most of the studied compositions, the clay appears to be partially exfoliated. However, in one particular sample (that with 4 % of clay) it seems to be completely exfoliated. None of the investigated samples shows signs of a clay intercalation. Further studies are in progress to clarify these points.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

Gravedad Cuántica Multidisciplinar.

Code or Reference: FIS2008-03221

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: Jesús Fernando Barbero González.

Duration: January 2009-December 2009.

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

Cosmología cuántica de lazos, agujeros negros y relatividad numérica.

Code or Reference: FIS2008-06078-C03-03.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guillermo Antonio Mena Marugán.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Research in Loop Quantum Cosmology and investigation of the physical predictions of this theory. Application of numerical simulations to General Relativity.

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

Code or Reference: CSD2007-00042.

Funding Institution: MICINN.

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

Duration: October 2007-November 2012.

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 al Experimento ISOLDE del CERN.

Code or Reference: CAC 2007-11.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: December 2007-December 2009.

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.

Code or Reference: CDS2007-00042.

Funding Institution: MEC Consolider- Ingenio 2010.

Main Researcher: Antonio Pich / IP IEM: M^a José García Borge.

Duration: December 2007-December 2012.

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.

Code or Reference: AICI A/012424/07.

Funding Institution: MAE.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Tarek El Bardouni (Fac des Sciences, Tetuan, Marruecos).

Duration: January 2008- January 2009.

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.

Code or Reference: CICYT -IN2P3 08-07.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: María José García Borge (IEM, CSIC, España).

Bertram Blank (CENBG, CNRS, Francia).

Duration: June 2008- May 2009.

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

Contribución al Experimento ISOLDE del CERN.

Code or Reference: ICTS-2008-01-11.

Funding Institution: MEC Consolider- Ingenio 2010.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: October 2008- June 2010.

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

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Code or Reference: FPA2008-04114-E/IN2P3.

Funding Institution: MICIN-IN2P3.

Main Researcher: María José García Borge (IEM, CSIC, España).
Bertram Blank (CENBG, CNRS, Francia).

Duration: June 2009- May 2010.

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".

Propiedades de núcleos con halo y avances en el estudio de Reacciones de interés astrofísico.

Code or Reference: FPA2008-04712-E/PORTU.

Funding Institution: MICIN.

Main Researcher: María José García Borge (IEM, CSIC, España).
Daniel Galaviz Redondo (CENBG, Lisboa, Portugal).

Duration: March 2009- February 2010.

Objectives: The objective is to study Coulomb dipolarizability of halo nuclei on heavy targets at energies close to the Coulomb barrier.

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

Code or Reference : MAT2006-26572-E.

Funding Institution: MICYT.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: 2007-2009.

Objectives: Neutron scattering advance instrumentation development for the amplification of ISIS installation.

Proyecto ITUR: Fuente de Iones y Stand de Pruebas.

Code or Reference: PNE-20071027.

Funding Institution: CDTI.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: 2007-2009.

Objectives: First dynamic simulations of H⁻ beams to adjust the SNS source to the ITUR test stand.

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

Code or Reference: FIS2006-12783-C03-01.

Funding Institution: DGI.

Main Researcher: Jorge Dukelsky.

Duration: 1st of January 2006- 31st of December 2009.

Objectives: The goal of this research sub-project is the development of new exact analytic and numerical methods for treating strongly correlated many-body quantum systems like cold atom gases, heavy nuclei and quantum magnetism.

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

Code or Reference: 2007BG0011

Funding Institution: MEC-IEM (CSIC) –INRNE (Academy of Science of Bulgaria)-

Main Researcher: Dr. P. Sarriguren y Dr. M. Gaidarov.

Duration: January 2008- December 2009.

Objectives: Nuclear structure and reactions of exotic nuclei.

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

Code or Reference: MAT2007-65711-C04-01.

Funding Institution: MICYT.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: 2007-2010.

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

Reacciones y Estructuras Nucleares Exóticas.

Code or Reference: FIS2008-01301.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Dr. Eduardo Garrido.

Duration: January 2009- December 2011.

Objectives: Beta-decay of exotic nuclei. Electron Scattering from Nuclei. Three-body systems, structure and reactions.

Dinámica y estructura de núcleos exóticos ligeros. Prototipo de doble cristal para el calorímetro

CALIFA del experimento R3B en FAIR.

Code or Reference: CICYT FPA2007-62170.

Funding Institution: MICYT.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: October 2007- March 2010.

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

Participación española en el Centro Europeo de Física Nuclear Teórica y Áreas Relacionadas (ECT*)

Code or Reference: ACI2009-1019.

Funding Institution: MICIN.

Main Researcher: Elvira Moya de Guerra Valgañón.

Duration: September 2009- September 2010.

Objectives: Spanish participation in the European Center for Theoretical Nuclear Physics and related areas.

Electroweak interaction and nuclear structure.

Code or Reference: UCM-GS 2008-2009.

Funding Institution: UCM-Grupo Santander. Programa: Vitsitantes distinguidos.

Main Researcher: Elvira Moya de Guerra Valgañón.

Prof. invited: T.W. Donnelly

Duration: February 2009- February 2010.

Objectives: Study of parity violation and other electroweak processes in nuclei.

Estudios de estructura nuclear en núcleos exóticos.

Code or Reference: FPA2007-66069.

Funding Institution: DGI-MEC.

Main Researcher: J. Luis Egido de los Ríos.

Duration: 2007- 2009.

Objectives: Experimental and theoretical studies of the structure of exotic nuclei.

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

Code or Reference: PCI2006-A7-0548.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Dr. J.A. Caballero.

Duration: January 2008- December 2009.

Objectives: Scaling in lepton-nucleus scattering. Momentum distributions and reactions in exotic nuclei.

Sistemas de fermiones fuertemente correlacionados: estructura, dispersión y aplicaciones.

Code or Reference: FIS2008-04189.

Funding Institution: MICYT.

Main Researcher: José Miguel Arias Carrasco.

Duration: January 2009- December 2011.

Objectives: To study fermion systems where the interactions are generally strong using many body techniques.

Dispersión, estructura y tracking de núcleos exóticos.

Code or Reference: FPA2006-13807-C02-01.

Funding Institution: MICYT.

Main Researcher: Joaquín Gómez Camacho.

Duration: October 2006-September 2009.

Objectives: Scattering and structure studies of exotic nuclei.

Few-body approach to direct nuclear reactions.

Code or Reference: PTDC/FIS/65736/2006.

Funding Institution: Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Portugal).

Main Researcher: António Fonseca.

Duration: 2008-2011.

Objectives: Application of few-body techniques to direct nuclear reactions.

Few-body approaches applied to nuclear reactions with exotic nuclei.

Code or Reference: PORT2008-05.

Funding Institution: MCYT (Spain) y Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Portugal).

Main Researcher: Antonio Moro Muñoz (Spain) y António Fonseca (Portugal)

Duration: July 2008- December 2009.

Objectives: Application of few-body techniques to direct nuclear reactions with exotic nuclei.

Física Nuclear Básica.

Code or Reference: FMQ160.

Funding Institution: Junta de Andalucía.

Main Researcher: Manuel Lozano Leyva.

Duration: 2009.

Objectives: Group financial support.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Desarrollo de inyectores de potencia para aceleradores de protones de última generación.

Code or Reference: FETS.

Company: CDTI -Programa nacional del espacio-.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: 2007-2011.

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.

Code or Reference: FIS205-02029.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: Dionisio Bermejo Plaza.

Duration: January 2006 -December 2009.

Objectives: Rotational energy transfer rates and spectroscopic parameters of gas phase molecules.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).

Code or Reference: S-0505/TIC-0191, Subproyecto IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Subproyecto IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP proyecto: Fernando Cussó, UAM).

Duration: January 2006-December 2009.

Objectives: Development of SERS and SEIRA molecular nanosensors.

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

Code or Reference: FIS2007-61686.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: R. Escribano.

Duration: October 2007- September 2010.

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.

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

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: Victor J. Herrero.

Duration: September 2006- September 2009.

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.

Colisiones moleculares de interés astrofísico y atmosférico.

Code or Reference: FIS2007-61430.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: October 2007-October 2010.

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.

Investigation of superfluidity in highly supercooled para-hydrogen by means of inelastic light scattering.

Code or Reference: HD2008-0068.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2009-December 2010.

Objectives: Prospective experiments to search for the predicted superfluidity in liquid para-hydrogen.

Estudios sobre fenómenos de ionización y transporte en gases ionizados y desarrollo de técnicas de espectroscopía optogalvánica en plasmas fríos.

Funding Institution: CSIC (Scientific program for short visits to foreign laboratories).

Main Researcher: Isabel Tanarro.

Duration: July 6-17, 2009.

Objectives: Start of collaborations between the Cold Plasma Laboratory of the Instituto de Ciencias Físicas of the Universidad Nacional Autónoma de México in Cuernavaca and the homonymous laboratory of the Instituto de Estructura de la Materia del CSIC.

Estudio de procesos de relajación colisional en moléculas de interés astrofísico y atmosférico por espectroscopía Raman de alta resolución

Code or Reference: PIE 200850I046

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Raúl Z. Martínez Torres.

Duration: October 2008 - December 2009.

Objectives: Study of collisionally mediated rotational energy transfer in gaseous molecules by stimulated Raman spectroscopy.

Control Cuántico de moléculas adsorbidas en superficies.

Code or Reference: Acción Integrada con Hungría HH2006-0023.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: J. Ortigoso Martínez.

Duration: June 2007- December 2009.

Objectives: Control of rotational motion for molecules close to a surface.

ASTROCAM. Red de astrofísica de la Comunidad de Madrid.

Code or Reference: S-0505-ESP-000237.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla (Centro de Astrobiología CSIC) / Participant researchers of the FM Department Salvador Montero Martín, José M. Fernández Sánchez, Guzmán Tejeda Gala.

Duration: January 2006-December 2009.

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.

Code or Reference: PNE2007-65475-C02-01.

Funding Institution: Plan Nacional de Espacio.

Main Researcher: Santiago Arribas Mocoroa.

Duration: 2007 – 2010.

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.

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

Funding Institution: European Southern Observatory.

Main Researcher: Niranjn Thatte (Oxford University).

(PI CSIC: Santiago Arribas Mocoroa).

Duration: 2008 – 2009.

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.

Code or Reference: PNAYA2008-00992-E.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Santiago Arribas Mocoroa.

Duration: 2008 – 2010.

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.

Code or Reference: PITN-GA-2008-214227.

Funding Institution: European Commission.

Main Researcher: Stéphane Charlot (Insitut d'Astrophysique de Paris).

(PI CSIC: Santiago Arribas Mocoroa).

Duration: 2008 – 2012.

Objectives: Develop European expertise in searches for primeval galaxies to ensure maximun return of the instrument NIRSpec on board of the James Webb Space Telescope.

Desarrollo y explotación de instrumentación astronómica.

Code or Reference: S-0505/ESP-361.

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

Main Researcher: Jesús Gallego (Universidad complutense).

(PI CSIC: Luis Colina Robledo).

Duration: December 2005 – December 2009.

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

Galaxias luminosas infrarrojas y galaxias activas.

Code or Reference: 2008850I003.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Almudena Alonso Herrero.

Duration: October 2008-December 2009.

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.

Code or Reference: AYA2008-00446

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2008-2010

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.

Code or Reference: AYA2005-00702.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2005-2008.

Objectives: Determination of structural and spectroscopic properties of molecular species of astrophysical relevance: carbon chains and prebiotic molecules.

Organización de las jornadas científicas "Granada 09": métodos teóricos para el estudio de especies moleculares de interés astrofísico.

Code or Reference: AYA2009-05801-E

Funding Institution: MICINN

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2009-2010.

Objectives: Organization of the Granada 09 workshop and perspectives.

Optimización de procesos en Grids de computadores para la operación de organizaciones virtuales en entornos científicos.

Code or Reference: PCI08-0008

Funding Institution: Consejería de Educación y Ciencia de Castilla-La Mancha. Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha.

Main Researcher: Camelia Muñoz Caro

Duration: 2008-2010.

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.

Code or Reference: CTQ2006-04161/BQU.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: October 2006 – October 2009.

Objectives: New infrared and Raman sampling accessories for time resolved deuteration measurements and subsequent 2D spectroscopic analysis.

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

Code or Reference: CTQ2007-60177/BQU.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: Marta Castillejo Striano.

Duration: October 2007- September 2010

Objectives: Study of the gas phase reactivity and properties of species generated in the ablation plume and photodissociation plasmas that are intermediates for the deposition of certain nanostructured materials.

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

Code or Reference: FIS2007-63065.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Duration: October 2007-August 2010.

Main Researcher: José Vicente García Ramos.

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).

Code or Reference: S-0505/TIC-0191, Subproyecto IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Subproyecto IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP proyecto: Fernando Cussó, UAM).

Duration: January 2006-December 2009.

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.

Code or Reference: 2007SK0002.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-Academia de Ciencias Eslovaca.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: 2008-2009.

Objectives: SERS+SEF characterization of the interaction between antitumoral drugs with anthraquinone structure and biomolecules involved in drug delivery.

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

Code or Reference: 2007CL0029.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-CONICYT (Chile).

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2008-December 2009.

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

Preparación y caracterización de sistemas transportadores de principios biológicos.

Code or Reference: GR58/08-Grupo 950247.

Funding Institution: University Complutense of Madrid.

Main Researcher: Francisco García Blanco.

Duration: January 2009-December 2010.

Objectives: Development of new drug delivery systems.

Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas

Code or Reference: FIS2006-07894.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: October 2006-September 2009.

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

Engineering METamaterials (EMET)

Code or Reference: CSD2008-00066.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

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

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: January 2009-December 2013.

Objectives: To consolidate an excellence network on Metamaterials in Spain, investigating fundamental processes throughout the EM spectral range and in Acoustics, and developing applications for photonic and acoustic devices.

3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20070031.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Duration: 2007-2009.

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

Estructura, dinámica y sus interrelaciones en materiales poliméricos nanoestructurados en una, dos y tres dimensiones.

Code or Reference: MAT2009-07789.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: December 2009-December 2012.

Objectives: To advance in the understanding of the underlying physics soft matter nanostructuring.

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

Code or Reference: MAT2005-01768.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: December 2005-July 2009.

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.

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20060160.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2007-December 2009.

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

Visualización y simulación de la influencia del plegado macromolecular en la formación de cristales poliméricos y en la funcionalidad de proteínas.

Code or Reference: MAT2009-12364.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Duration: 2010-2012.

Objectives: This project is focussed on the determination of the role of the macromolecular folding in the formation of polymer single crystals and co-crystallisation of linear and branched macromolecules, and also on the conformational changes in proteins as a consequence of the interaction with ligands.

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

Code or Reference: MAT2006-0400.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Duration: 2006-2009.

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.

Code or Reference: S-0505/PPQ/000328.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana and Víctor Cruz Cañas (IEM); *Project Leader:* Pascual Royo García (Universidad de Alcalá).

Duration: 2006-2009.

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.

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

Code or Reference: FIS2007-60534.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Duration: November 2007-November 2010.

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).

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

Code or Reference: MA-472.

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

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: September 2008-July 2009.

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

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

Code or Reference: Proyecto PETRI (PET-2007-0186-03).

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Amelia Linares Dos Santos.

Duration: January 2008-December 2010.

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

Macromolecular motion in isotropic nanoconfinement.

Code or Reference: 2007/R1.

Funding Institution: Royal Society.

Main Researcher: Aurora Nogales and Joao Cabral.

Duration: January 2008-December 2009.

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 of “soft” matter.

Fundamentos de la nanoestructuración volúmica y superficial de copolímeros en bloque.

Code or Reference: MAT2008-03232/NAM.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Study of the fundamentals that determine volume and surface nanostructuring in block copolymers.

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

Code or Reference: PIE 200850I072.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Juan Francisco Vega Borrego.

Duration: October 2008- December 2009.

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 THE INDUSTRIAL COMPANIES

Study of the molecular effects on the kinetics of melt miscibility between LLDPE and LDPE, and its modification with external means.

Company: DOW Chemicals.

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

Duration: 1 January 2009-30 April 2010.

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.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES / NATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

Towards the Observation of Hawking Radiation in Condensed Matter Systems, Valencia, 1-7th of February 2009.

- *Sensitivity of Hawking radiation to superluminal dispersion relations* (Invited talk), C. Barceló, L.J. Garay and G. Jannes.

Jerte Advanced Relativity Meeting, Navaconcejo, 1-4th of April 2009.

- *Modelos cosmológicos* (Oral presentation), Guillermo A. Mena Marugán.
- *Lapso en cosmología* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito.
- *¿Homogéneo e isótropo?* (Oral presentation), Javier A. Olmedo Nieto.

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

IV Congreso Nacional BIFI2009, BIFI, Universidad de Zaragoza, 5-7th of February 2009.

- *Conductance of laser-driven quantum wires* (Invited talk), Rafael A. Molina.

Workshop on Symmetries and Quantum Transitions in Nuclear Collective Models, Sevilla, 18-20th of February 2009.

- *Microscopic formulation of nuclear shape transitions* (Invited talk), Pedro Sarriguren.
- *Nuclear Masses Calculated with Image Reconstruction Techniques and Garvey-Kelson relations* (Oral contribution), José Barea Muñoz.

IV Encuentros de Física Nuclear, Ciudad Real, 7-8th of September 2009.

- *Phase Shift calculation in three-body systems with the hyperspherical adiabatic expansion method* (Oral Contribution), C. Romero-Redondo, E. Garrido, P. Barletta, A. Kievsky, M. Viviani.

XXIII Biental de Real Sociedad Española de Física, Ciudad Real, 7-11th of September 2009.

- *Dispersión de electrones en FAIR: el experimento ELISE*, (Oral Contribution) Javier R. Vignote.
- *Estudio de la desintegración beta del núcleo con $N=Z$ ^{72}Kr* (Oral Contribution), J.A. Briz, M. J. G. Borge, A. Maira, A. Perea, O. Tengblad, J. Agramunt, A. Algora, M. E. Estevez Aguado, E. Náchter, B. Rubio, L. M. Fraile, A. Deo, G. Farrelly, W. Gelletly y Z. Podolyak.
- *Últimos Avances en detectores de centelleo de alta resolución en montaje phoswic* (Oral Contribution) M. Carmona-Gallardo, J.A. Briz, M.J.G Borge, V. Gugliermi, B. El Bakkari, O. Tengblad.
- *Estudio de los efectos del halo en la dispersión de ^{11}Li con un blanco pesado a energías cercanas a la barrera coulombiana* (Oral Contribution), Mario Cubero, M.J.G. Borge, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, C. Diget, D. Galaviz, J.P. Fernández-García, J. Gomez-Camacho, J.A. Lay, M. Madurga, I. Marte, A.M. Moro I, Mukha, A.M. Sánchez-Benitez, A. Shotton, O. Tengblad, P. Walden.

XVI Congreso de Física Estadística, Huelva, Spain, 10-12th of September 2009.

- *Scientific committee meeting*, Carlos Cabrillo García.

Primeras jornadas del CPAN, El Escorial, Madrid, 24-27th of November 2009.

- *Nuclear Structure and Dynamics* (Invited talk), Andrea Jungclaus.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

VI Reunión Española de Optoelectrónica (OPTOEL'09), Málaga, 15-17th of July 2009.

- *Caracterización mediante análisis micro-Raman de guías de onda acanaladas fabricadas por difusión de Zn^{2+} en LiNbO_3* (Poster), M. Quintanilla, E. Cantelar, F. Cussó, C. Domingo.

IX Reunión Nacional de Óptica, Ourense, 14-17th of September 2009.

- *Líneas de investigación del grupo de Espectroscopía de Superficies y Fotónica de Plasmones Superficiales del Instituto de Estructura de la Materia* (Oral presentation), I. Izquierdo-Lorenzo, E.del Puerto, R. de Llanos, R. Rodríguez-Oliveros, L. Guerrini, Z. Jurasekova, V. Giannini, S. Sánchez-Cortés, J.A. Sánchez-Gil, P. Sevilla, J.V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with EVPM)

- *Espectroscopia Raman aplicada al estudio de chorros supersónicos de mezclas de H2 y N2*. (Poster), Guzmán Tejada, Angel Ramos, José María Fernández y Salvador Montero.

X Reunión de la Red Temática de Patrimonio del CSIC, Granada, 14-17th of October 2009.

- *Estudio de Materiales de Construcción mediante DRIFT: Efecto de la Concentración, Tamaño de Partícula y Presencia de Recubrimiento Protector*, (Oral presentation), P. M. Carmona Quiroga, M. T. Blanco Varela, C. Domingo, S. Martínez-Ramírez.
- *Detección SERS de colorantes orgánicos naturales en fibras textiles teñidas: análisis in situ y sin extracción química previa* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, G. Bruno, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.

(Together with EVPM)

- *Detección SERS del pigmento orgánico sintético Quinacridona Quinona utilizando Calixarenos como dispersantes* (Oral presentation), S. Sánchez-Cortés, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with EVPM)

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

IX Congreso de Fotoquímica, Leioa (Vizcaya), 20-23rd of September 2009.

- *Time-resolved optical emission spectroscopic studies of ambient air induced by a high-power TEA-CO2 pulsed* (Panel), J.J. Camacho, L. Díaz, M. Santos, L. Juan, E. Martín, J.M.L. Poyato.

IX Reunión Nacional de Óptica, Ourense, 14-17th of September 2009.

- *Líneas de investigación del grupo de Espectroscopía de Superficies y Fotónica de Plasmones Superficiales del Instituto de Estructura de la Materia* (Oral presentation), I. Izquierdo-Lorenzo, E.del Puerto, R. de Llanos, R. Rodríguez-Oliveros, L. Guerrini, Z. Jurasekova, V. Giannini, S. Sánchez-Cortés, J.A. Sánchez-Gil, P. Sevilla, J.V. García-Ramos, C. Domingo.
- *Cálculo de resonancias de plasmones de superficie de dímeros metálicos mediante el modelo de hibridación y generalización a estructuras complejas* (Panel), R. Rodríguez-Oliveros, P. Albella, L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sánchez-Cortés, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos, C. Domingo, R. Aroca.
- *Fluorescencia del fármaco antitumoral emodina y su unión a la seroalbúmina bovina en presencia de nanopartículas de plata* (Panel), R. De-Llanos, P. Sevilla, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés and J.V. García-Ramos.

(Together with FM).

3rd Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulation, Madrid, 1-2nd of October 2009.

- *Solving Maxwell equations for applications in Nanophotonics through surface integral equations* (Invited talk), J. A. Sánchez-Gil.

X Reunión de la Red Temática de Patrimonio del CSIC, Granada, 14-17th of October 2009.

- *Detección SERS de colorantes orgánicos naturales en fibras textiles teñidas: análisis in situ y sin extracción química previa* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, G. Bruno, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.
- *Detección SERS del pigmento orgánico sintético Quinacridona Quinona utilizando Calixarenos como dispersantes* (Oral presentation), S. Sánchez-Cortés, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with FM).

4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Programa General XXXII Bial de la Real Sociedad Española de Física, Ciudad Real, 10-12th of September 2009.

- (Participation), Francisco J. Baltá Calleja.

IV Reunión de Usuarios de Radiación Sincrotrón de España (AUSE), Barcelona, 15-18th of September 2009.

- *Shear effect on the templated crystallization of poly(butylene terephthalate)/SWCNT nanocomposites* (Poster), [Jaime J. Hernández Rueda](#), Mari Cruz García-Guérrez, Aurora Nogales, Daniel Rueda, Tiberio Ezquerra.
- *Structure and morphology of TiO₂ thin films on silicon wafer* (Poster), [L. González García](#), A. Barranco, A. Muñoz Páez, A.R. González-Elipe, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra.
- (Participation), M. Cruz García Gutiérrez.

XVIII Encuentro Anual de la Asociación Alexander von Humboldt de España, Salamanca, 17-20th of September 2009.

- (Participation), Francisco J. Baltá Calleja.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES / INTERNATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

2009 APS March Meeting, Pittsburgh (USA), 16-20th of March 2009.

- o *Kohn-Luttinger Superconductivity in Graphene* (Oral contribution), [José González](#).

Black holes and Loop Quantum Gravity, Valencia (Spain), 26-28th of March 2009.

- o *On the computation of BH entropy in LQG* (Invited talk), Iván Agulló, [Jesús Fernando Barbero González](#), Jacobo Díaz Polo, Enrique Fernández Borja y Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

4th Iberian Cosmology Meeting, Madrid (Spain), 16-17th of April 2009.

- o *Covariant Effective Action for LQC a la Palatini* (Oral contribution), [Gonzalo J. Olmo](#) and P. Singh.

Invisible Universe International Conference, Paris (France), 29th of June-3rd of July 2009.

- o *New Phenomenology for Palatini $f(R)$ Gravity: Non-Singular Universes* (Oral contribution), [Gonzalo J. Olmo](#).
- o *Covariant Effective Action for LQC a la Palatini* (Oral contribution), [Gonzalo J. Olmo](#) and P. Singh.

12th Marcel Grossman Meeting, Paris (France), 11-18th of July 2009.

- o *Generating functions for black holes in loop quantum gravity* (contributed talk), [Jesús Fernando Barbero González](#) y Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.
- o *Big Bounce in Inhomogeneous Cosmologies* (Oral contribution), David Brizuela, [Guillermo A. Mena Marugán](#) and Tomasz Pawłowski.
- o *Static Spherically Symmetric Solutions in Extended Palatini Gravity* (Oral contribution), [Gonzalo J. Olmo](#), H. Sanchis-Alepuz and S. Tripathi.
- o *Enriched Phenomenology in Extended Palatini Theories* (Oral contribution), [Gonzalo J. Olmo](#), H. Sanchis-Alepuz and S. Tripathi.
- o *Avoiding the Big Bang Singularity with Palatini $f(R)$ Theories* (Oral contribution), C. Barragán, [Gonzalo J. Olmo](#) and H. Sanchis-Alepuz.
- o *Concept of Evolution in LQC: Vacuum Bianchi I* (Oral contribution), Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán and [Tomasz Pawłowski](#).
- o *Flux-area operator and black hole entropy in loop quantum gravity* (Oral contribution), Jesús Fernando Barbero González, Jerzy Lewandowski y [Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor](#)
- o *Uniqueness of the Quantization of a Scalar Field on SI with Time Dependent Mass: A Generalization of the Case of Gowdy Cosmologies* (Oral contribution), J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán and [J. M. Velhinho](#).

Graphene Workshop, Benasque (Spain), 25th of July-8th of August 2009.

- o *Propagating, Evanescent, and Localized States in Carbon Nanotube-Graphene Junctions* (Invited talk), [José González](#).

International Conference on Quantum Gravity - Loops '09, Beijing (China), 2-7th of August 2009.

- o *Concept of Evolution in Loop Quantum Cosmology: the Example of Vacuum Bianchi I Universe* (Oral contribution), Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán and [Tomasz Pawłowski](#).

- *Big Bounce in the Presence of Inhomogeneities* (Oral contribution), David Brizuela, Guillermo A. Mena Marugán and Tomasz Pawłowski.
- *Further Improvements in our Understanding of Isotropic Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán and Javier Olmedo.

Spanish Relativity Meeting – ERE 2009, Bilbao, 7-11th of September 2009.

- *Inflation, Renormalization, and CMB Anisotropies* (Oral contribution), I. Agulló, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo and Leonard Parker.

Mini-workshop on quantum gravity, Tainan (Taiwan), 26th of November 2009.

- *On the computation of black hole entropy in loop quantum gravity* (Invited talk), Iván Agulló, Jesús Fernando Barbero González, Jacobo Díaz Polo, Enrique Fernández Borja y Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

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

MAGISOL international collaboration Meeting 09, Madrid (Spain) 19-21st of January 2009.

- *GEANT4 simulations for the R3B calorimeter* (Oral Contribution), J.A.Bríz, M. Carmona-Gallardo, M.J.G. Borge, A. Perea, O. Tengblad and M. Turrión.
- *Cross section measurements on $^3\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}$ direct capture reaction at CMAM* (Oral Contribution), M. Carmona-Gallardo, B.S. Nara Singh, M.J.G. Borge, A. Maira, A. Muñoz, A. Perea y O.Tengblad.
- *Preliminary results of the P08 experiment* (Oral Contribution), Angel Perea Martinez.

Arbeitstreffen Kernphysik, Schleching (Germany), 26th of February-5th of March of 2009.

- *The structure of exotic nuclei* (Invited Talk), Andrea Jungclaus.

European Nuclear Physics Conference, ENPC 2009, Bochum (Germany), 16-20th of March 2009.

- *A Monolithic Detector Telescope Assembly with Multiplexed Electronic Readout* (Oral Contribution), Olof Tengblad, Miguel Madurga, Mariano Carmona Gallardo, and Goran Nyman.
- *Halo effects in the Scattering of ^{11}Li on heavy target* (Oral contribution), Olof Tengblad, MJG Borge, J.Gomez Camacho, and I. Martel.
- *Isospin symmetry in the $A=12$ system using both beta decay and $M1$ gamma decays.* (Oral contribution), Martin Alcorta Moreno, O. Kirsebom, M.J.G. Borge, C. Aa. Diget, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, M. Madurga, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, and O. Tengblad.
- *Beta-delayed particle emission studies* (Oral contribution), Ricardo Domínguez Reyes.
- *Characterization of the 101 keV isomeric state in ^{72}Br* (Oral Contribution), J.A.Bríz, M. J. G. Borge, A. Maira, A. Perea, O. Tengblad, J. Agramunt, A. Algora, M. E. Estevez Aguado, E. Nacher, B. Rubio, L. M. Fraile, A. Deo, G. Farrelly, W.Gelletly and Z.Podolyak.
- *A High Resolution Phoswich Detetor: $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ coupled with $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$* (Oral Contribution), M. Carmona-Gallardo, J.A. Briz, M.J.G Borge, V. Gugliermi, B. El Bakkari, O. Tengblad, M. Turrión y A. Perea.
- *Reaction study of ^{11}Li on ^{208}Pb target at energies close to the Coulomb barrier* (Oral Contribution), Mario Cubero, M.J.G. Borge, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, C. Diget, D. Galaviz, J.P. Fernández-García, J. Gomez-Camacho, J.A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, A.M.Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad, P. Walden.

International Conference on Nuclear Structure and Dynamics, Dubrovnik, (Croatia), 4-8th of May 2009.

- *Nuclear shape transitions from a microscopic approach* (Oral Contribution), P. Sarriguren, R. Rodríguez-Guzman, L.M. Robledo.
- *Nuclear structure of ^{12}C from breakup studies in complete kinematics* (Oral contribution), Martin Alcorta Moreno, O. Kirsebom, M.J.G. Borge, C. Aa. Diget, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, M. Madurga, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, and O. Tengblad.

Radioactive Nuclear Beams 8, Grand Rapids, Michigan State (USA), 24-29th of May 2009.

- *Halo effects in the Scattering of ^{11}Li on heavy targets at energies around the Coulomb barrier* (Oral Contribution), M^a José García Borge, M. Cubero, L. Acosta, M. Alcorta, M. Alvarez, Ch. Aa. Diget, J.P. Fernandez, J.A. Lay, J. Gómez-Camacho, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, A. M. Sánchez-Benítez, O. Tengblad and P. Walden. V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil and E. R. Méndez.

- *Nuclear structure of ^{12}C from breakup studies in complete kinematics* (Póster), Martin Alcorta Moreno, M.J.G. Borge, C. Aa. Diget, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, O. Kirsebom, M. Madurga, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, and O. Tengblad.

Matrix Elements for the Double-beta-decay Experiments (MEDEX'09), Prague (Czech Republic), 15-19th of June 2009.

- *Calculation of neutrinoless double beta decay in the interacting boson model* (Oral contribution), José Barea Muñoz.
- *Single-state dominance and other relevant issues to BDDME* (Invited talk), Elvira Moya de Guerra Valgañón.

International Scientific Meeting on Nuclear Physics: Basic concepts in Nuclear Physics: Theory, experiment and applications, La Rábida (Huelva), 4-10th of July 2009.

- *Four-body continuum-discretized coupled-channels calculations* (Póster), Manuela Rodríguez Gallardo, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho, A. M. Moro, I. J. Thompson, and J. A. Tostevin.
- *Conversion coefficients studies in the β -decay of ^{72}Kr* (Póster), J.A.Bríz, M. J. G. Borge, A. Maira, A. Perea, O. Tengblad, J. Agramunt, A. Algora, M. E. Estevez Aguado, E. Náchter, B. Rubio, L. M. Fraile, A. Deo, G. Farrelly, W. Gelletly and Z. Podolyak.
- *A High Resolution Phoswich Detector: $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ Coupled With $\text{LaCl}_3(\text{Ce})$* (Poster) M. Carmona, J.A. Briz, M.J.G Borge, V. Gugliemina, B. El Bakkari, O. Tengblad, M. Turrión y A. Perea.
- *Dynamic studies of ^{11}Li and its core ^9Li on lead near the Coulomb barrier* (Póster), Mario Cubero, M.J.G. Borge, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, C. Diget, D. Galaviz, J.P. Fernández-García, J. Gomez-Camacho, J.A. Lay, M. Madurga, I. Marte, A.M. Moro, I. Mukha, A.M. Sánchez-Benítez, A. Shotter, O. Tengblad, P. Walden.
- *Few-Body reactions in Nuclear Astrophysics* (Oral Contribution), R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen.
- *New beta-delayed particle emission studies* (Oral contribution), Ricardo Domínguez Reyes.

Linking Nuclei, Molecules, and Condensed Matter: Computacional Quantum Many-Body Approaches, ECT* Workshop 2009, Trento (Italy), 6-10th of July 2009.

- *Hierarchical Mean Field* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

Program of the Institute of Nuclear Theory: From Femtoscience to Nanoscience: Nuclei, Quantum Dots, and Nanostructures, University of Washington, Seattle (USA), 20th of July-28th of August 2009.

- *Integrable pairing models in nuclear and mesoscopic physics* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.
- *Localization and transport in laser-driven quantum wires* (Invited Talk), Rafael A. Molina.

10th International Conference in Nucleus-Nucleus Collisions, Beijing (China), 16-21st of August 2009.

- *Accurate calculation of phase shifts. Application to three-body reactions with the adiabatic expansion method* (Oral contribution), E. Garrido, C. Romero-Redondo, P. Barletta, A. Kievsky, M. Viviani.

6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (IDMRCS 6), Rome (Italy), 30th of August- 5th of September 2009.

- *New effects in thermal conductivity of molecular* (Póster), A. I. Krivchikov, O. A. Korolyuk, I. V. Sharapova, O. O. Romantsova, F. J. Bermejo, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, I. Bustinduy.
- *Disordered effects in heat transport of a molecular glassy crystal* (Poster), I. V. Sharapova, A. I. Krivchikov, O. A. Korolyuk, A. Jezowski, L. C. Pardo, M. Rovira-Esteva, J. L. Tamarit, F. J. Bermejo.

21st Indian-Summer School of Physics: The Nuclear Many-Body Problem, Praga (Czech Republic) 31st of August-4th of September 2009.

- *Exactly solvable pairing models for fermion and boson systems* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

19th International IUPAP Conference on Few-Body Problems in Physics, Bonn (Germany), 31st of August-5th of September 2009.

- *Astrophysical reaction rates for ^6He and ^9Be production by electromagnetic radiative capture and four-body recombination* (Oral Contribution), R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen.
- *Phase shift calculations for three-body reactions using the adiabatic expansion method* (Oral contribution), C. Romero-Redondo, E. Garrido, P. Barletta, A. Kievsky, M. Viviani.

XVIII Simposio Peruano de Física, Arequipa (Peru), 24th of August-6th of September 2009.

- *Localization and transport in laser-driven quantum wires* (Invited talk), Rafael A. Molina.

16th Euro School on Exotic Beams 2009, Leuven (Belgium), 4-11th of September 2009.

- *Nuclear structure of ^{12}C from breakup studies in complete kinematics.* (Poster), Martin Alcorta Moreno, M.J.G. Borge, C. Aa. Diget, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, O. Kirsebom, M. Madurga, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, and O. Tengblad.
- *Beta-delayed particle emission studies* (Poster), Ricardo Domínguez Reyes.

XIV International Conference on Small-Angle Scattering (SAS09), Oxford (U.K.), 13-18th of September 2009.

- *A novel real space scattering theory: efficient characterization of colloidal crystals* (Talk), C. Cabrillo, E. Enciso, M. J. Capitán, A. Cabañas, M. J. Torralvo, J. Alvarez and F. J. Bermejo.

25th Workshop on Shape-Phase Transitions and Critical Point Phenomena in Nuclei, Istanbul (Turkey), 16-18th of September 2009.

- *Non-equilibrium dynamics of isolated systems* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

XVIII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications, Varna (Bulgaria), 21-27th of September 2009.

- *Microscopic description of shape evolution in medium-mass nuclei* (Invited Talk), Pedro Sarriguren, R. Rodríguez-Guzmán, L.M. Robledo.
- *Astrophysical reaction rates for ^6He and ^9Be production by electromagnetic radiative capture and four-body recombination.* (Invited talk), E. Garrido, R. de Diego, D.V. Fedorov, A.S. Jensen.

Internacional Workshop on Strong, Weak and Electromagnetic interactions to probe spin-isospin excitations, ECT*, Trento (Italy), 28th of September – 2nd of October 2009.

- *QRPA calculations for beta-decay in medium-mass nuclei* (Invited Talk), Pedro Sarriguren.

International Conference on Carbon Nanostructured Materials (CNANO'09), Santorini (Greece), 4-8th of October 2009.

- *Uptake of Molecular Hydrogen by High-performance Carbon Nanostructures* (Talk), C. Cabrillo, F. Fernandez-Alonso, F.J. Bermejo, R. Fernández-Perea, C. Mondelli, M.A. González, R.O. Loutfy, and M.-L. Saboungi.

International Workshop on Electroweak interactions with nuclei: Scaling and superscaling, Trento (Italy), 26-30th of October 2009.

- *Superscaling analysis and neutrino scattering from nuclei* (Invited Talk), A.N. Antonov, E. Moya de Guerra.

ISOLDE Workshop, CERN, Geneva (Switzerland), 18-20th of November 2009.

- *HIE-ISOLDE: A look to the Physics* (Invited Talk), M^a José García Borge.

23rd Workshop on Quantum Chaos: Theory and Applications, Buenos Aires (Argentina), 1-4th of December 2009.

- *Integrable pairing models in nuclear and mesoscopic physics* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

ISNP 2009 International Nuclear Physics Symposium, Mumbai (India) 8-12th of December 2009.

- *NUSTAR and the status of the R3B project at FAIR* (Invited Talk), Olof Tengblad.

VIII Latin American Symposium on Nuclear Physics and Applications, Santiago (Chile), 15-19th of December 2009.

- *New advances in neutrinoless double beta decay matrix elements* (Oral contribution), José Barea Muñoz.

Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2009), Tallahassee, Florida (USA), 16-19th of December 2009.

- *Study of reactions induced by the Borromean nucleus ^6He at energies around the Coulomb barrier* (Oral presentation), Manuela Rodríguez Gallardo, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho, A. M. Moro, I. J. Thompson, and J. A. Tostevin.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

6th NanoSpain Conference, Zaragoza, 9-12th of March 2009.

- *Surface plasmon resonances of metal nanoparticle dimers through the hybridization model and generalization to nanoparticle chains* (Oral presentation), R. Rodríguez-Oliveros, P. Albella, L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sánchez-Cortés, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos, C. Domingo, R. Aroca.

(Together with EVPM).

- *Chemically-driven formation of silver nanoparticle dimers with tuned interparticle distance for SERS sensing applications* (Poster), I. Izquierdo-Lorenzo, L. Guerrini, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with EVPM).

European Geosciences Union (EGU), Vienna (Austria), 19 – 24th of April 2009.

- *Interaction of HCl with a b-NAT surface: Prediction of the IR Spectrum*, (Oral), B. Martín-Llorente, R. Escribano, D. Fernández-Torre, O. Gálvez, V.J. Herrero, B. Maté and M.A. Moreno.
- *Infrared spectra and thermodynamic properties of CO₂/methanol ices* (Oral), Belén Maté, Óscar Gálvez, Víctor J. Herrero and Rafael Escribano.
- *Infrared spectra and thermodynamic properties of CH₄/H₂O ices*, (Poster), Óscar Gálvez, Belén Maté, Víctor J. Herrero and Rafael Escribano.
- *Theoretical study of atmospheric clusters: HNO₃:HCl:H₂O* (Poster), Pedro Gómez, Rafael Escribano and Oscar Gálvez.
- *Quantum chemical study of ternary mixtures of: HNO₃:H₂SO₄:H₂O*, (Poster) Maria Angeles Verdes, Pedro Gómez, Rafael Escribano and Oscar Gálvez.

Ultrafast dynamic imaging of matter II (UDIM09), Ischia (Italy), 30 April-3 May 2009.

- *Femtosecond studies of the photodissociation of CH₃I via the B band*. (Poster), G. Gitzinger, M. E. Corrales, J. Durá, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares.
- *Imaging real time bond breaking in molecules and clusters*, (Oral presentation), R. de Nalda, J. Durá, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares.

Quantum Fluid Clusters (QFC09), Dresden (Germany), 25–27th of May 2009.

- *Raman spectroscopy of H₂ and D₂ clusters*. (Poster), J.H. Morilla, G. Tejada, S. Montero, y J.M. Fernández.
- *Clustering of para-H₂ in jets by Raman spectroscopy*. (Poster), J.H. Morilla, G. Tejada, S. Montero, y J.M. Fernández.

E-MRS 2009 Spring Meeting, Strasbourg (France), 8-12th of June 2009.

- *PLD of heavy metal oxide thin film glasses: How metastable structures allow improving the nonlinear optical properties?* (Oral presentation), D. Muñoz-Martin, J. Gonzalo, J. M. Fernandez-Navarro, J. Solis, C. N. Afonso, C. Domingo, J. V. Garcia-Ramos.

(Together with EVPM).

4th International Conference on Surface Plasmon Photonics (SPP4), Amsterdam (The Netherlands), 21-26th of June 2009.

- *Chemically-driven formation of silver nanoparticle dimers with tuned interparticle distance for SERS sensing applications* (Poster), L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, C. Domingo.

(Together with EVPM).

Goldschmidt Conference 2009, Davos (Switzerland), 21-26th of June 2009.

- *Analysis and interpretation of microbial fossils in extreme environment of Dry Valley rocks, Antarctica*, (Poster), C. Ascaso, A. de los Ríos, C. Domingo, J. Wierzbos.

64th OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (OH, USA), 22-26th of June 2009.

- *Measurements of Rotational state-to-state Relaxation Coefficients by Raman-Raman Double Resonance. Application to self-collisions in Acetylene*. (Oral presentation), J.L. Doménech, R.Z. Martínez and D. Bermejo.

10 International Workshop on Quantum Reactive Scattering, Dalian (China), 2-6th of July 2009.

- *Kinematic effect in the study of the H₃⁺ and its connection with the statistical behaviour*. (Poster) P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and M. Hanckel.
- *Cumulative reaction probabilities in the dynamics of the H+H₂ reactions*. (Invited lecture), F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and M. Hanckel.

XVIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Litsvianka (Russia), 4-10th of July 2009.

- *Measurements of state-to-state Relaxation Coefficients by Raman-Raman Double Resonance*. (Poster), D. Bermejo, J.L. Doménech and R.Z. Martínez.

10 Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, Santiago de Compostela (Spain), 12-15th of July 2009.

- *The dynamics of the isotopic variants of the $H^+ + H_2$ reactions: Can they be considered statistical reactions?*. (Invited lecture), F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and J. M. Alvaríño
- *Femtosecond studies of the photodissociation of CH_3I via the B band*. (Poster), M. E. Corrales, G. Gitzinger, J. Durá, G. A. Amaral, R. de Nalda, L. Bañares.
- *Slice imaging of the photodissociation of CH_3I in the A band: comparison between experiment and multisurface wave packet calculations*. (Poster), J. Rodríguez, L. Rubio-Lago, A. García-Vela, A. Arregui, G. A. Amaral, L. Bañares.
- *The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*. (Poster), A. Arregui, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, L. Bañares.
- *Roaming dynamics: formaldehyde, acetaldehyde and acetone*, (Oral presentation), A. Arregui, L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, L. Bañares.

29th Internacional Conference on Physics of Ionized Gases (ICPIG), Cancún (Mexico), 12-17th of July 2009.

- *Isotope mixing in plasmas of H_2 and D_2 by ion processes and wall reactions*, (Poster), I. Tanarro, V. J. Herrero.

18th International Laser Physics Workshop (LPHYS'09), Barcelona (Spain), 13-17th of July 2009.

- *Quantum polarization spectroscopy of correlations in ultracold bosonic and fermionic systems* (Talk), Mirta Rodríguez Pinilla, T. Roscilde, A. Sanpera, M. Lewenstein and E.-S. Polzik.
- *Imaging the femtochemistry of CH_3I* , (Invited lecture) J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares.

XXIV International Conference in Photochemistry (ICP2009), Toledo (Spain), 19-24th of July 2009.

- *Imaging the femtosecond photochemistry of CH_3I* , (Invited lecture), J. Durá, R. de Nalda, J. G. Izquierdo, G. A. Amaral, L. Bañares.

30th International Symposium on Free Radicals, Savonlinna (Finland), 25-30th of July 2009.

- *The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*. (Poster), G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, L. Bañares.
- *Femtosecond studies of the photodissociation of CH_3I via the B band*. (Poster) G. A. Amaral, M. E. Corrales, J. Durá, G. Gitzinger, R. de Nalda, L. Bañares.

19th International Symposium on Plasma Chemistry (ISPC), Bochum (Germany), 26-31st of July 2009.

- *Neutral and Ionic Chemistry in Low Pressure DC Plasmas of Hydrogen and Deuterium Mixtures* (Poster), I. Tanarro, V. J. Herrero.
- *Plasma and surface diagnostics of silicon nitride thin film coatings generated by $SiH_4 + NH_3$ RF discharges*. (Poster), I. Tanarro, M. M. Sanz, M. F. Romero, E. Muñoz, A. Jiménez.

International Conference on Magnetism - ICM 2009, Karlsruhe (Germany), 26-31st of July 2009.

- *Deposition patterns obtained with a nanoparticle sputtering gun*. (Poster) M. Sanz, I. Tanarro, C. Aroca, M. Maicas, P. Sánchez .

238th American Chemical Society Meeting, Washington D.C (USA), 16-20th of August 2009.

- *The radical channel in acetaldehyde photodissociation: sudden change in mechanism from 315 nm to 330 nm*. (Poster) G. A. Amaral, A. Arregui, L. Rubio-Lago, L. Bañares.

International Conference on Physics of Optical Materials and Devices, ICOM2009, Herceg Novi (Montenegro), 27-30th of August 2009.

- *Micro-Raman characterization of Zn-diffused $LiNbO_3$ channel waveguides*, (Poster), M. Quintanilla, E. Cantelar, F. Cussó, C. Domingo.

XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules (XIII ECSBM), Palermo (Italy), 28th of August–2nd of September 2009.

- *Fluorescence study of the interaction between antitumoral drug emodin and bovine serum albumin in presence of silver nanoparticles* (Poster), R. de Llanos, P. Sevilla, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.
- *SERS+SEF study on piroxicam over Ag nanoparticles* (Poster), P. Sevilla, R. de Llanos, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.
(Together with EVPM).

21st Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy, Castellammare di Stabia (Italy), 31st of August – 4th of September, 2009.

- *HNO₃:HCl:H₂O clusters: prediction of spectra*, (Poster), Rafael Escribano, Oscar Gálvez, Pedro Gómez.
- *Measurements of rotational state-to-state Relaxation Coefficients by Raman-Raman Double Resonance. Application to self-collisions in Acetylene*. (Poster), J.L. Doménech, R.Z. Martínez, and D. Bermejo.

5th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA2009), Bilbao (Spain), 14-19th of September 2009.

- *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) applied to the detection of organic pigments and dyes in Cultural Heritage objects* (Invited Plenary Lecture), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
- *Surface-enhanced Raman Scattering of quinacridone quinone pigment employing Calixarenes as dispersive cavitands* (Poster), E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM).

ICAM09 (International Conference on Advanced Materials), Rio de Janeiro (Brasil), 20-25th of September 2009.

- *Detection of Polychlorinated Pesticides by Surface-Enhanced Raman Scattering on Silver Nanoparticles Functionalized with α,ω -Aliphatic Diamines*. (Oral presentation), S. Sanchez-Cortes, L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM).

28th Meeting of Dyes in History and Archaeology (DHA28), Poznan (Poland), 21-24th of October 2009.

- *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) applied to the detection of organic pigments and dyes in Cultural Heritage objects* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
(Together with EVPM).

American Geophysical Union (AGU), San Francisco (USA), 14-18th of December 2009.

- *CH₄/H₂O ices: infrared spectra and thermodynamic properties* (Poster), Rafael Escribano, Óscar Gálvez, Belén Maté and Víctor J. Herrero.

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

CanariCam Science Workshop, Instituto de Astrofísica de Canarias (Spain), 6-10th of May 2009.

- *Mid-infrared ground-based imaging observations of LIRGs and ULIRGs*. (Invited Talk), Almudena Alonso Herrero

Advanced workshop on theoretical and computational methods for molecular spectroscopy and collisions: application to astrophysical and atmospheric relevant systems, Granada (Spain), 7–10th of May 2009.

- *Electronic structure of the $[M_gO_3]^+$ cation*. A. ben Houria, O. Yazidi, M. Hochlaf and M.L.Senent.
- *Low-temperature rate constants for rotational excitation and de-excitation of $C_3(X^1\Sigma_g^+)$ by collisions with $He(^1S)$* . D.ben Abdallah, K.Hammami, F. Najar, N.Jaidane, Z.ben Lakhdar, M.L.Senent, G.Chambaud and M.Hochlaf
- *Rotational excitation of SO₂ by H₂ in cold dark clouds*. C. Balança, F. Dayou, L. Cressiot-Vincent, A. Faure, N. Feautrier, M.L. Senent, A. Spielfiedel and L. Wiesenfeld.
- *Ab initio characterization of linear-C₆*. H.Massó and M.L.Senent.
- *Study about some isomers the SiC₃ and Prediction of Reactive Sites for SiC₃H Using Electron Localization Function (ELF)*, N. Inostroza, P. Fuentealba, J. R. Letelier and M. L. Senent.

Tidal Dwarf Galaxies: Ghosts from structure formation, Bonn (Germany), 25-29th of May 2009.

- *Imaging survey of star formation in (U)LIRGs*. (Talk), Luis Colina Robledo, Daniel Miralles Caballero.
- *Star formation and TDG candidates in (U)LIRGs*. (Poster), Daniel Miralles Caballero, Luis Colina.

Molecular Spectroscopy Conference, Ohio State University, Ohio (USA), June 2009.

- *Ethane asymmetric C-H stretching vibrational spectra*. M.Villa, M.L.Senent and R.Hidalgo.

SFR@50: Filling the Cosmos with Stars, Abazzia di Spineto (Italy), 6-10th of July 2009.

- *Star Formation Rates for Infrared Bright Galaxies*. (Invited Talk), Almudena Alonso Herrero.

Astrochemistry symposium IUPAC2009, Glasgow (United Kingdom) August 2009.

- *CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of various isotopomers of ethyl-methyl-ether*. M.L.Senent, R.Ruiz, M.Villa and R.Domínguez-Gómez.
- *Ab initio characterization of C₄ and C₄H: neutral forms and anions*. M.L.Senent, M.Hochlaf and H.Massó.
- *Rotational excitation of SO₂ by H₂ at low temperature*. C. Balança, L.C.Vincent, F.Dayou, A.Faure, N.Feautrier, M.L.Senent, A.Spielfiedel and L. Wiesenfeld.

Quitel XX, San Antonio (Colombia) September 2009.

- *Caracterización mediante métodos ab initio de alto nivel de las especies C₄ y C₄H de importancia astrofísica: formas neutras y aniónicas*. (Invited talk), M.L.Senent.
- *Estudio CCSD(T) del espectro FIR del etil-metil-eter y de sus variedades isotópicas*. R.Domínguez-Gómez, M.L.Senent, R.Ruiz and M.Villa.

QSPC-XIV, El Escorial, Madrid (Spain), September 2009.

- *CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of various isotopomers of ethyl-methyl-ether*. (Invited talk), M.L.Senent.

Reionization to Exoplanets: Spitzer Growing Legacy, Pasadena (USA), 26-28th of October 2009.

- *Spitzer/IRS spectral mapping of luminous infrared galaxies*. (Poster), Miguel Pereira Santaella, Almudena Alonso Herrero, George H. Rieke and Luis Colina.

Galaxy Wars: Stellar Populations and Star Formation in Interacting Galaxies, Tennessee (USA), 19-22nd of July 2009.

- *VLT / VIMOS Integral Field Spectroscopy of a Representative Sample of Local (U)LIRGs*.(Talk), S. Arribas.

Ciencia con el ELT desde el hemisferio norte, CSIC-Madrid (Spain), 17-18th of April 2009.

- *Sinergias entre el E-ELT (European Extremely Large Telescope) y el JWST (James Webb Space Telescope)* (Invited Talk), S. Arribas.

53° Congresso SAI (Società Astronomica Italiana), Pisa (Italy), 4-8th of May 2009.

- *First steps towards studying the kinematics of (U)LIRGs: VLT-VIMOS integral field spectroscopy* (Poster), E. Bellocchi.

ELIXIR workshop, Oxford (UK), 11-12th of December 2009.

- *Kinometry of a sample of ULIRGs* (Talk), E. Bellocchi.

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

6th NanoSpain Conference, Zaragoza, 9-12th of March 2009.

- *Surface plasmon resonances of metal nanoparticle dimers through the hybridization model and generalization to nanoparticle chains* (Oral presentation), R. Rodríguez-Oliveros, P. Albella, L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sánchez-Cortes, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos, C. Domingo, R. Aroca.
- *Chemically-driven formation of silver nanoparticle dimers with tuned interparticle distance for SERS sensing applications* (Poster), I. Izquierdo-Lorenzo, L. Guerrini, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortes, J. V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with FM).

IV International Symposium on Advanced Materials and Nanostructures, Santo André (Brasil), 17-19th of May 2009.

- *Surface plasmon coupling, hot spots, and surface enhanced spectroscopy* (Oral presentation), G. Moula, R. Rodríguez, P. Albella, J. A. Sánchez-Gil, R. Aroca.

E-MRS 2009 Spring Meeting, Strasbourg (France), 8-12th of June 2009.

- *PLD of heavy metal oxide thin film glasses: How metastable structures allow improving the nonlinear optical properties?* (Oral presentation), D. Muñoz-Martin, J. Gonzalo, J. M. Fernandez-Navarro, J. Solis, C. N. Afonso, C. Domingo, J. V. Garcia-Ramos.
(Together with FM).

4th International Conference on Surface Plasmon Photonics (SPP4), Amsterdam (The Netherlands), 21-26th of June 2009.

- *Localized excitation of surface plasmon polaritons by individual semiconductor nanowires* (Oral presentation), J. Gómez Rivas, J. Treffers, T. Rümke, O. L. Muskens, J. A. Sánchez-Gil.
- *Surface integral scattering formulation for the EM wave scattering from 2D-3D particles of arbitrary shape: surface plasmon resonances in metallic nanoantennas* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil.
- *Chemically-driven formation of silver nanoparticle dimers with tuned interparticle distance for SERS sensing applications* (Poster), L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with FM).

7th EBSA European Biophysics Congress, Genova (Italy), 11-15th of July 2009.

- *Biospectroscopic probes for real time measurement of hydrogen-deuterium exchange.* (Poster), P. Carmona and M. Molina.

XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules (XIII ECSBM), Palermo (Italy), 28th of August–2nd of September 2009.

- *Structure of a 25mer HCV RNA studied by Raman spectroscopy.* (Poster), P. Carmona, M. Molina and A. Rodríguez-Casado
- *Fluorescence study of the interaction between antitumoral drug emodin and bovine serum albumin in presence of silver nanoparticles* (Poster), R. de Llanos, P. Sevilla, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos
- *SERS+SEF study on piroxicam over Ag nanoparticles* (Poster), P. Sevilla, R. de Llanos, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos.
(Together with FM).

5th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA2009), Bilbao (Spain), 14-19th of September 2009.

- *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) applied to the detection of organic pigments and dyes in Cultural Heritage objects* (Invited Plenary Lecture), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
- *Surface-enhanced Raman Scattering of quinacridone quinone pigment employing Calixarenes as dispersive cavitands* (Poster), E. del Puerto, S. Sánchez-Cortés, J.V. García-Ramos, C. Domingo.
(Together with EVPM).

ICAM09 (International Conference on Advanced Materials), Rio de Janeiro (Brasil), 20-25th of September 2009.

- *Enhanced Raman and Fluorescence by Metal Nanostructures* (Oral presentation), V. Giannini, R. Rodríguez-Oliveros, I. Izquierdo-Lorenzo, J. V. García-Ramos, J. A. Sánchez-Gil, O. Muskens, J. Gómez Rivas.
- *Detection of Polychlorinated Pesticides by Surface-Enhanced Raman Scattering on Silver Nanoparticles Functionalized with α,ω -Aliphatic Diamines.* (Poster), S. Sanchez-Cortes, L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
(Together with FM).

28th Meeting of Dyes in History and Archaeology (DHA28), Poznan (Poland), 21-24th of October 2009.

- *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) applied to the detection of organic pigments and dyes in Cultural Heritage objects* (Oral presentation), C. Domingo, Z. Jurasekova, E. del Puerto, J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
(Together with FM).

4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Satellite Meeting: SAXS/WAXS Experiments at HASYLAB Status and Perspectives, DESY, Hamburg (Germany), 28-30th of January 2009.

- *Nanostructure of Multilayered polymer films using USAXS and SAXS* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja and Fernando Ania.
- *Nanostructure of Semicrystalline Polymer films: A Comparative GISAXS and AFM Study* (Invited lecture), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Annual HASYLAB Users Meeting 2009, DESY, Hamburg (Germany), 30 and 31st of January 2009.

- (Participation), Francisco J. Baltá-Calleja.

Workshop ‘Structures & Dynamics of Soft Surface and Interfaces’, Grenoble (France), 3rd and 4th of February 2009.

- *Nanostructure of crystallizing polymer thin films*. (Poster), Jaime J. Hernández, Mari Cruz García-Gutiérrez, Daniel Rueda, Aurora Nogales and Tiberio Ezquerra.

Brainstorming Meeting of the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (France), 22-24th of February 2009.

- *Big molecules under confinement studied by X-ray microdiffraction* (Invited lecture), Mari Cruz García-Gutiérrez.

Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France), 22-24th of April 2009.

- (Participation), Tiberio A. Ezquerra Sanz.

13th Symposium on Layered Nanostructures: Polymers with Improved Properties, Martin Luther University Halle-Wittenberg, Halle (Germany), 12-13th of May 2009.

- *On line structure formation in nanolayered polymers using synchrotron radiation and nanoindentation techniques* (Invited lecture), Francisco J. Baltá Calleja, Fernando Ania, A. Hiltner, E. Baer and D. Khariwala.

BIONyX: Jornadas sobre el uso de neutrones y rayos X en biología, Barcelona (Spain), 22nd of May 2009.

- (Ponente mesa redonda “X-rays & Neutrons: Complementarities”), Tiberio A. Ezquerra Sanz.
- *Low resolution model of a membrane protein in detergent solution obtained from SANS* (Invited lecture) Aurora Nogales Ruíz.

EBSA 2009 ‘European Biophysics Congress Genoa’, Genoa (Italy), 11-15th of July 2009.

- *Molecular Dynamics simulation of CB1 and CB2 cannabinoid receptors in solution* (Poster), Víctor Cruz, Javier Ramos and Javier Martínez-Salazar.

EPF’09 “European Polymer Congress 2009”, Graz (Austria), 12-17th of July 2009.

- *Evaluation of the transition from free Rouse to constrained reptation in polyethylene by computer simulation* (Invited lecture), Javier Martínez-Salazar.

6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma (Italy), 1-4th of September 2009.

- *Segmental Dynamics Of Semicrystalline Poly(Vinylidene Fluoride) Nanorods* (Poster), J Martín, C Mijangos, A Sanz, T.A. Ezquerra and A. Nogales.
- *Dynamics of Nanocomposites Based On Polystyrene And Fullerenes Studied By Dielectric And Scattering Techniques* (Poster), A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra and J Cabral.
- *Fragility and Cold Crystallization In Polymers* (Oral presentation) A. Sanz, A. Nogales and T. A. Ezquerra.

Synchrotron Radiation in Polymer Science 4, Kerkrade (Holland), 8-11th of September 2009.

- *Confinement effects in one-dimensional polymer arrays as revealed by X-ray microdiffraction* (Oral Presentation), M.C. García Gutiérrez, A. Linares, J.J. Hernández, D.R. Rueda and T.A. Ezquerra.
- *Lamellar cristal orientation in ultrathin films of aliphatic polyesters* (Oral Presentation) D.R. Rueda, J.J. Hernández, M.C. García Gutiérrez, A. Nogales, A. Linares, M. Socio, N. Lotti, T.A. Ezquerra.
- *Interplay between amorphous and crystalline domains during isothermal and no isothermal crystallization of a polymers by simultaneous SAXS, WAXS and Dielectric Spectroscopy* (Oral presentation), A. Nogales, A. Sanz and T.A. Ezquerra.

GISAXS 2009, Hamburg (Germany), 20-24th of September 2009.

- *Structure and morphology of TiO₂ thin films on silicon wafer* (Poster), L. González García, A. Barranco, A. Muñoz Páez, A.R. González-Elipse, M.C. García Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda and T. A. Ezquerra.
- *Morphology of aliphatic polyesters thin films* (Poster), J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, A. Nogales and T.A. Ezquerra.

JCNS Workshop: Trends and Perspectives in Neutron Scattering on Soft Matter, Tutzing (Germany), 5-8th of October 2009.

- *Probing Ordering Processes in Soft Condensed Matter by using Time Resolved Techniques: from Neutrons to Photons* (Invited lecture), Tiberio A. Ezquerra Sanz.

V International Conference on Science and Technology of Composite Materials: 8º Congreso Nacional de Materiales Compuestos, San Sebastián (Spain), 7-9th of October 2009.

- *Morphology and properties recycled composite materials of polypropylene and cellulose fibres.* (Oral presentation), Almudena Ochoa, Carmen Fonseca, Teresa Aguinaco, Carlos González and Fernando Ania García.

Petra III Extension Workshop, DESY, Hamburg (Germany), 10-12th of November 2009.

- (Participation). Francisco J. Baltá Calleja.

Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France). 18-20th of November 2009.

- (Participation), Tiberio A. Ezquerra Sanz.

International Conference on Polymers and Advanced Materials, POLYMAT 2009, Huatulco (Mexico). 22-26th of November 2009.

- *Relaxations in Polyethylene: a comparative study of computer simulation and experimental observations.* (Invited lecture), Javier Martínez-Salazar, Javier Ramos and Juan F. Vega.
- *3D-QSAR tools for the structure-activity analysis of single site polymerization catalysts* (Invited lecture), Víctor Cruz, Javier Ramos and Javier Martínez-Salazar.
- *Microfiller reinforced thermotropic polymers. Microstructure and mechanical properties.* (Poster), Oswaldo Flores, Luis Arias, Iván Puente, Araceli Flores Aguilar-Amat, Ángel Romo-Urbe and Bernardo Campillo.
- *Microstructure, mechanical properties and fracture behaviour of PVC-bentonite nanocomposites.* (Poster) María Eugenia Romero-Guzmán, Luis Arias, Oswaldo Flores, Araceli Flores Aguilar-Amat, Ángel Romo-Urbe, Bonifacio Alvarado Tenorio y Bernardo Campillo.

Workshop Material Science Seminar des Landesexzellenzclusters “Integrated Material Systems”, Technische Universität Hamburg-Harburg (Germany), 14th of December 2009.

- *Online structure deformation in nanolayered polymers using X-ray scattering and nanoindentations methods* (Invited Lecture), Francisco J. Baltá Calleja.

ESRF and ILL Joint Workshop on “Scattering and Complementary Techniques”, Grenoble (France), 17-18th of December 2009.

- Partnership in Soft Condensed Matter.
- *On the use of Carbon Nanotubes as templates for polymer crystallization* (Invited lecture) Tiberio A. Ezquerra Sanz.
- *Low resolution model for the human platelet integrin $\alpha IIb\beta 3$ in solution* Aurora Nogales Ruíz (Poster), Aurora Nogales Ruíz.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Dr. Amit Ghosh**, Saha Institute of Nuclear Physics, Kolkata, India, 22-29th of March 2009.
- ❖ **Dr. Madhavan Varadarajan**, Raman Research Institute, Bangalore, India, 24th of March-3rd of April 2009.
- ❖ **Johannes Tambornino**, Max Planck Institute for Gravitational Physics, Potsdam, Germany, 9-11th of December 2009.

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

- ❖ **Prof. Anton Antonov**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 10-17th of November 2009.
- ❖ **Prof. Sevdalina Dimitrova**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 5-12th of November 2009.
- ❖ **Prof. G. G. Dussel**, Universidad de Buenos Aires, Argentina, 15-27th of March 2009.

- ❖ **Prof. Hans Fynbo**, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Denmark, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Prof. Mitko Gaidarov**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 30th of October to 6th of November 2009.
- ❖ **Prof. Björn Jonson**, Fundamental Physics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Prof. Alejandro Kievsky**, INFN, Pisa, Italy, 23-27th of March 2009.
- ❖ **Prof. Thomas Nilsson**, Fundamental Physics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Prof. Göran Nyman**, Fundamental Physics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Prof. S. Pittel**, Universidad de Delaware, USA, 21-26th of September 2009.
- ❖ **Prof. Karsten Riisager**, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Denmark, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Prof. N. Sandulescu**, Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Romania, 11-18th of November 2009.
- ❖ **Dr. R. Alvarez-Rodriguez**, INFN, Pisa, Italy, 23-27th of March 2009.
- ❖ **Dr. P. Barletta**, University College London, United Kingdom, 23-27th of March 2009.
- ❖ **Dr. Pavel Cejnar**, Institute of Particles & Nuclear Physics, Faculty of Mathematics & Physics, Charles University, Prague, Czech Republic, 16-21st of February 2009.
- ❖ **Dr. Christian Diget**, Nuclear astrophysics Department, University of York, United Kingdom, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Dr. Martin Ivanov**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 10-17th of November 2009.
- ❖ **Dr. Antonio Moro**, Dpto. de Física Atomica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad de Sevilla, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Jacob Johansen**, Ph.D. Student, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Denmark, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Oliver Kirseborn**, Ph.D. Student, Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Denmark, 19-21st of January 2009.
- ❖ **Elisabeth Tengborn**, Ph.D. Student, Fundamental Physics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 19-21st of January 2009.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Robert E. Grisenti**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 16–21th of February 2009.
- ❖ **Prof. J. Peter Toennies**, MPI für Dynamik und Selbstorganisation, Göttingen, Germany, 16–21st of February 2009.
- ❖ **Dr. Anton Kalinin**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 16–21st of February 2009.
- ❖ **Dr. Tobias Kramer**, Regensburg University, Germany, 4-11th of October 2009.
- ❖ **Dr. Viktor Szalay**, Research Institute for Solid State Physics and Optics, Hungary Academy of Sciences, Budapest, Hungary, 14-25th of September 2009.
- ❖ **Dña./Ms Inmaculada Colmenero González**, Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, 23–27th of March 2009.
- ❖ **D./Mr. Matthias Kühnel**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 16–21th of February 2009 and 19th of November–19th of December 2009.
- ❖ **Dña./Ms María Cruz Millán Fernández**, Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, 12–18th of March 2009.
- ❖ **D./Mr. Alberto Moreno Sanroma**, Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, 30th of March–3rd of April 2009.

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

- ❖ **Prof. F. Hammer**, Paris Observatory, France.
- ❖ **Prof. Claudia Maraston**, UK.
- ❖ **Prof. Anne McCoy**, Ohio State University (USA), May 2009.
- ❖ **Prof. María Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana de Mexico, September 2009.
- ❖ **Dr. N. Foster-Schreiber**, Max Planck Institut for Astrophysics, Munich, Germany.

- ❖ **Dr. J. Gorosabel**, Instituto de Astrofísica de Andalucía, Spain.
- ❖ **Dr. M. Huertas**, European Southern Observatory, Germany.
- ❖ **Dr. P. Pérez Gonzalez**, Universidad Complutense de Madrid, Spain.
- ❖ **Dr. J.D. Smith**, Ritter Observatory, USA.
- ❖ **Dña/Ms Dalila Hammoutene**, Université des sciences et technologie Houari Boumediene (Algeria) May 2009.
- ❖ **Dña/Ms Natalia Pilar Inostroza**, Universidad Andrés Bello (Chile), March 2009.

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

- ❖ **Prof. Marcelo Campos-Vallette**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 12-30th of June.
- ❖ **Dra. Gabriela Fabriciova**, Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 9-16th of June.
- ❖ **Dr. Ornella Francioso**, Agrarian Faculty, Bologna University, Italy, 19-24th of October.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 9-16th of June.
- ❖ **Dr. Demetrio Macías**, Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique (ICD-LNIO), Université de technologie de Troyes (UTT), Troyes, France, July 2009.
- ❖ **Dra. Lorena Roldán**, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, Argentina, 1st of October-31st of December 2009.
- ❖ **Ldo. Alvaro Aliaga**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 1st of April-30th of June 2009.
- ❖ **Ldo. Vadym Prokopec**, Institute of Chemical Technology, Check Republic, 1st August-30th October 2009.

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Prof. Joao T. Cabral**, Department of Chemical Engineering, Imperial College London, London, UK, 6-11th of January 2009 and 14-17th of June 2009.
- ❖ **Prof. Julia S. Higgins**, Department of Chemical Engineering, Imperial College London, London, UK, 12-16th of June 2009.
- ❖ **Prof. H.R. Kricheldorf**, Institut für Technische und Makromolekulare Chemie, Universität Hamburg, Hamburg, Germany, 23-28th of May 2009.
- ❖ **Prof. Simone Napolitano**, Department of Physics and Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, 18-23th of March 2009.
- ❖ **Dr. Him Cheng Won**, Department of Chemical Engineering, Imperial College London, London, UK, 6-11th of January 2009.
- ❖ **Dr. Ioannis G. Economou**, Institute of Physical Chemistry, National Center for Scientific Research "Demokritos", Athens, Greece, 2nd of July 2009.
- ❖ **Dr. Ángel Romo Uribe**, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca Morelos, México, 29th of June-11th of July 2009.
- ❖ **Dr. Lourdes del Valle Carrandi**, Universidad del País Vasco, 26-28th of October 2009.
- ❖ **Mr. Abdelhak Hellati**, Centre Universitaire Bordj Bou Arreridj, Algeria, 17th of January-7th of February 2009.
- ❖ **Mariselis Trujillo, Msc.** Universidad Simón Bolívar, Venezuela, 15th April-30th of May 2009.

4.4. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED CONFERENCES

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

Prof. A. Ashtekar, L. Freidel and C. Rovelli.
 Penn State (USA), Perimeter Institute (Canada) and CPT-Marseille (France).
Recovering Low Energy Physics: A Discussion.
 5th May 2009.

Prof. John Barret.

University of Nottingham, UK.
Asymptotics of Spin Foam Models with an Immirzi Parameter.
21st of April 2009.

Prof. Saurya Das.
University of Lethbridge, Canada.
A New Uncertainty Principle near the Planck Scale and its Phenomenological Implications.
10th of July 2009.

Prof. Jerzy Lewandowski.
Warsaw Univeristy, Poland.
Spin Foams from Loop Quantum Gravity Perspective.
20th of October 2009.

Prof. Don Marolf.
University of California in Santa Barbara, USA.
Unitarity and Holography in Gravitational Physics.
13th of January 2009.

Prof. Richard Woodard.
University of Florida, USA.
Questions and Answers in Perturbative Quantum Gravity.
22nd of September of 2009.

International Loop Quantum Gravity Seminars:
(By phone conference, together with 13 other international centers)

Dr. Eugenio Bianchi.
CPT-Marseille (France).
Aharonov-Bohm and LQG.
6th of October 2009.

Dr. Craig Hogan.
Fermilab, USA.
Holographic Noise.
31st of March 2009.

Dr. Alok Laddha.
Raman Research Institute, India.
Polymer Parameterized Field Theory.
1st of December 2009.

Dr. Simone Mercuri.
Penn State University, USA.
Immirzi Parameter et al.
3rd of March 2009.

Dr. Daniele Oriti.
Albert Einstein Institute, Germany.
Group Field Theory and All That.
3rd of November 2009.

Jacobo Díaz Polo.
Universidad de Valencia, Spain.
Black Hole Entropy and Number Theory.
10th of February 2009.

Frank Hellmann.
University of Nottingham, UK.
The Asymptotics of 4d Spin Foam Models from SU(2) Asymptotics.
17th of November 2009.

Adam Henderson.

Penn State University, USA.

Path Integrals in LQCL.

17th of March 2009.

Johannes Tambornino.

Max Planck Institute for Gravitational Physics, Potsdam, Germany.

Born Oppenheimer Decomposition for Quantum Fields on Quantum Spacetimes.

10th of December 2009.

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

Prof. J. Gonzalez.

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Propiedades electrónicas del grafeno.

11th of February 2009.

Prof. N. Sandulescu.

Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Rumania.

Two spatial correlations induced by pairing in nuclear systems.

13rd of November 2009.

Prof. G. Sierra.

Instituto de Física Teórica, CSIC.

An exactly solvable pairing model with $P + IP$ wave symmetry.

12th of March 2009.

Dr. Pavel Cejnar.

Institute of Particles & Nuclear Physics. Faculty of Mathematics & Physics. Charles University, Prague, Czech Republic.

Chaos in the collective dynamics of atomic nuclei.

18th of February 2009.

Dr. Jaime Merino.

Universidad Autónoma de Madrid.

Interplay of Coulomb correlations and geometrical frustration in two-dimensional systems.

23rd of June 2009.

Dr. Yolanda Prezado.

ID17 Biomedical Beamline, ESRF, Grenoble France.

Aplicaciones Médicas de la radiación Síncrotrón: nuevas técnicas de la radioterapia para tumores cerebrales.

27th of April 2009.

D. Sigmund Kohler.

Instituto de Ciencias de Materiales, CSIC.

Dissipative Landau-Zener tunneling.

9th of June 2009.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dr. Tobias Kramer

University of Regensburg, Germany.

Wave packet methods for calculating transport properties of mesoscopic systems

6th of October 2009.

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

Prof. F. Hammer.

GEPI, Observatory of Paris, France.
The Formation of the Disk in Grand-design Spirals.
22nd of September 2009.

Prof. C. Maraston.
Center for Cosmology, University of Portsmouth, UK.
Synthetic Stellar Population Templates Modelling.
7th of October 2009.

Dr. N. Forster-Schreiber.
Max Planck Institut für Extraterrestrische Physik, Munich, Germany.
Resolving the Dynamics and Physical Properties of $z = 2$ galaxies.
28th of November.

Dr. J. Gorosabel.
Instituto de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Spain.
The nature of GRB galaxies.
10th of May 2009.

Dr. M. Huertas.
European Southern Observatory, Germany.
Classification in large extragalactic surveys: estimating morphologies.
26th of March 2009.

Dr. J.D. Smith.
Ritter Observatory, USA.
Digging for Dust and AGN in the Back Yard.
23rd of March 2009.

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

Dra. Sagrario Martínez Ramírez.
Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja (CSIC).
Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales de construcción.
16th of March 2009.

Lic. Alvaro Aliaga.
Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago.
Adhesión entre péptidos de interés biotecnológico y superficies metálicas nanoestructuradas: Caracterización de la interacción péptido-nanopartícula metálica mediante espectroscopia SERS.
15th of June 2009

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Prof. Joao T. Cabral.
Department of Chemical Engineering, Imperial College London, London, UK.
Novel routes for 3D nanopatterning using soft matter: wave frontal growth and multi-axial surface instabilities.
9th of January 2009.

Prof. Julia S. Higgins.
Department of Chemical Engineering, Imperial College, London, UK.
Neutron Scattering from Polymer Mixtures and Interfaces.
16th of June 2009.

Prof. Hans R. Kricheldorf.
Institut für Technische und Makromolekulare Chemie, Universität Hamburg, Germany.
History of Polymer Science and the Law of Self Dilution.
26th of May 2009.

Prof. Carmen Mijangos.

Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC.
Los polímeros. De la ciencia básica a las aplicaciones.
1st of December 2009.

Prof. Simone Napolitano.

Department of Physics and Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, Belgium.
Dielectric Spectroscopy of ultra thin polymer layers: From supported to freely standing films.
18th of March 2009.

Dr. Ioannis G. Economou.

Institute of Physical Chemistry, National Center for Scientific Research “Demokritos”, Athens, Greece.
Molecular Simulation of Macromolecular Systems: From Microscopic Structure to Macroscopic Physical Properties.
2nd of July 2009.

Dr. Ángel Romo Uribe.

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, México.
Nanocomposites and Shape Memory Polymer Networks.
1st of July 2009.

Mariselis Trujillo, Msc.

Universidad Simón Bolívar, Venezuela.
Caracterización física de nanocompuestos polimerizados “in situ”.
29th of April 2009.

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

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

José González Carmona.

- Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual, Benasque, Spain, 25th of July-8th of August 2009.

Jesús Fernando Barbero González.

- Institute of Physics, Academia Sinica (Taiwan), 17th of November-4th of December 2009.
- Department of Physics, National Cheng Kung University, Tainan (Taiwan) 21-27th of November 2009.

Guillermo A. Mena Marugán.

- Facultad de Ciencias, UNAM, and Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Mexico D.F., Mexico, 18-27th of April 2009.
- Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada, 20-29th of May 2009.

Luis J. Garay Elizondo

- Department of Physics, King's College, London, United Kingdom, 1st of March to 31st of August 2009.

Gonzalo J. Olmo.

- Department of Theoretical Physics, University of Valencia, Burjassot-Valencia, Spain, 15th of December 2008 to 9th of January 2009.
- University of Wisconsin-Milwaukee, Milwaukee, USA, 1st of October – 31st of December 2009.

Tomasz Pawlowski.

- Department of Theoretical Physics, University of Valencia, Spain, 25th of March to 1st of April 2009.
- Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Warsaw, Poland, 3-11th and 18-28th of July 2009.

David Brizuela Cieza.

- Facultad de Ciencias, UNAM, and Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Mexico D.F., Mexico, 18-29th of April 2009.
- Center for Scientific Computation and Mathematical Modelling, University of Maryland, USA, 24th of August to 23rd September 2009.

Mercedes Martín Benito.

- Max Planck Institute for Gravitational Physics, Potsdam, Germany, 28th of April to 28th of July 2009.

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

Jorge Dukelsky.

- University Carlos V, Prague, Czech Republic, 10-20th of June 2009.
- Universidad de Indiana, Bloomington, Indiana, USA, 12-19th of July 2009.

Carlos Cabrillo

- Institut Laue-Langevin, Grenoble, France, 2-11th of March 2009.
- Institut Laue-Langevin, Grenoble, France, 23th of March -5th of April 2009.
- ISIS Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, UK, OX11 0QX, 1-9th of December 2009.
- Institut Laue-Langevin, Grenoble, France, 11-22nd of November 2009.

Ricardo Fernández Perea.

- Institut Laue-Langevin, Grenoble, France, 2-11th of March 2009.
- Institut Laue-Langevin, Grenoble, France, 23rd of March to 5th of April 2009.
- ISIS Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, OX11 0QX, UK, 1-9th of December 2009.

Martín Alcorta Moreno.

- Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Aarhus, Denmark, 28th of June to 5th of July 2009.

José Antonio Briz Monago.

- ISOLDE at CERN (European Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 15-22nd of August 2009.
- ISOLDE at CERN (European Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 27th of October to 3rd of November 2009.

Carolina Romero Redondo.

- Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 28th of September to 26th of November 2009.

Mariano Carmona Gallardo.

- CERN- European Organization for Nuclear Research, Geneva, Switzerland, 3-10th of May 2009.
- CERN- European Organization for Nuclear Research, Geneva, Switzerland, 15-22nd of August 2009.

Mario Cubero.

- Centro de Física Nuclear da Universidade de Lisboa, Lisbon, Portugal, 25th of March to 5th of April 2009.
- Instituto Tecnológico Nuclear, Lisbon (Portugal), 24-31st of October 2009.

Ángel Perea.

- Kernfysisch Versneller Instituut, Groningen, Netherlands. 13-21st of January 2009.
- CERN- European Organization for Nuclear Research, Geneva, Switzerland, 3-10th of May 2009.
- CERN- European Organization for Nuclear Research, Geneva, Switzerland, 4-19th of August 2009.
- Instituto Tecnológico e Nuclear/Universidade de Lisboa, Lisbon, Portugal, 26-31st of October 2009.

Ibon Bustinduy.

- SNS -Oak Ridge National Lab-, Knoxville, Tennessee USA. 8th of November-9th of May 2009.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Salvador Montero Martín.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September–3rd of October 2009.

José Ma. Fernández Sánchez.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September–3rd of October 2009.

Isabel Tanarro Onrubia.

- Instituto de Ciencias Físicas. Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca (México), 6-17th of July 2009.

Guzmán Tejeda Gala.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27th of September–3rd of October 2009.

Óscar Gálvez González.

- Institute of Material Chemistry. Vienna University of Technology, Vienna (Austria), 13-19th of December 2009.

Mirta Rodríguez Pinilla.

- Department of Physics, University of Regensburg, 5-12th of June 2009.

Juan Hernández Morilla.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 27 September–3 October 2009.

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

María Luisa Senent Diez

- University of Paris-Est, Marne la Vallée, March 2009.
- Universidad Autónoma Metropolitana de México, June 2009.
- Observatorio de Paris-Meudon, December 2009.

Almudena Alonso Herrero.

- Dep. of Astrophysics, University of Oxford, UK, 28th of March to 10th of June 2009.
- Dep. of Astrophysics, University of Oxford, UK, 19th of June to 15th of September 2009.
- Steward Observatory, University of Arizona, USA, 28th of October to 3rd of November 2009.

Daniel Miralles Caballero.

- CNRS-CEA, Gif sur Yvette cedex, France, 3rd of June to 28th of September 2009.

Miguel Pereira Santaella.

- Steward Observatory, University of Arizona, USA, 29th of October to 21st of November 2009.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 1-8 November.
- Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 8-23 December.

José A. Sánchez Gil

- Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique (ICD-LNIO), Université de technologie de

Troyes (UTT), Troyes, France, 23 November-5 December.

Luis Diaz Sol.

- Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., Prague and University of West Bohemian, Faculty of Mechanical Engineering, Pilsen, Czech Republic. 2 November- 8 November, 2009.

Paz Sevilla.

- Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 1-8 November.

Luca Guerrini.

- Biophysical Engineering Group, Institute for Biomedical Technology, and MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente, The Netherlands, April-June.

Zuzana Jurasekova.

- Institute for Organic Synthesis and Photoreactivity, Consiglio Nazionale delle Ricerche, CNR, Bologna, Italy, December.

Irene Izquierdo Lorenzo.

- Biochemistry Department, Faculty of Sciences and Technology University of Coimbra, Portugal, October-December.

Elena del Puerto Nevado.

- Dipartimento di Ingegneria dell'Innovazione, Università degli Studi di Lecce, Italy, September-December.

Raquel de Llanos.

- Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 1-8 November.

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

- Martin Luther University Halle-Wittenberg, Halle, Germany, 11-18th of May 2009.
- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 8-14th of July 2009.
- DESY, Hamburg, Germany, 9-17th of November 2009.

M^a José Capitán Aranda.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 15-23rd of July 2009.

Javier Ramos Díaz.

- COMSE group, Department of Materials Science and Engineering, National Technical University of Athens, Greece, since 1st of November 2009 to 28th of February 2010. José Castillejo fellowship.

Alejandro Sanz Parras.

- Laboratorio Leon-Brillouin, Paris, France, 22-30th of June 2009.
- Laboratorio del reactor nuclear FRMII, Garching, Munich, Germany, 23rd of November to 1st of December 2009.

CAPÍTULO 5
LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA
Y OTRAS ACTIVIDADES

CHAPTER 5
TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO / MASTER COURSES

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

M^a José García Borge.

- Programa de Doctorado Interuniversitario de Física Nuclear. IFIC-Valencia.
Física Nuclear Experimental (4 créditos).
- European Master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics. Universidad Complutense de Madrid.
Experimental Techniques in Plasmas, Nuclear Physics and Materials (6 créditos).
- Master Universitario en tecnología e instrumentación Nuclear. Universidad de Huelva.
Fundamentos de la ingeniería nuclear (1 crédito).

Olof Tengblad.

- European Master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics. UCM, CIEMAT, CSIC.
Laboratory Project: Experimental techniques in plasmas, nuclear fusion and materials (6 créditos).
- Master Universitario en tecnología e instrumentación Nuclear. Universidad de Huelva.
Instrumentación nuclear básica (1 crédito).

Elvira Moya de Guerra Valgañón.

- Programa de Doctorado Universitario de Física Nuclear. UCM.
Estructura Nuclear (6 créditos).

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Salvador Montero Martín.

- Programa de doctorado interuniversitario con Mención de Calidad MEC “Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química” (QUIMILASER).
Experimentación Avanzada con Láseres (4 créditos).
Espectroscopías láser (3 créditos).

José Luis Doménech.

- Programa de doctorado interuniversitario con Mención de Calidad MEC “Láseres y Espectroscopía Avanzada en Química” (QUIMILASER).
Técnicas espectroscópicas e instrumentación (3 créditos).

Varios Autores (ver 5.2).

- Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) (4.6 créditos ECTS).

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

Santiago Arribas.

- Universidad Autónoma de Madrid (Cursos 2008-2009 y 2009-2010).
Introducción a la Espectroscopia de Campo Integral y sus aplicaciones (6 hours).
Temas Avanzados de Astrofísica y Cosmología.

Luis Colina Robledo.

- Escuela de Ingeniería Superior Aeronáutica. Universidad Politécnica de Madrid.
Infrared Scientific Missions and Instrumentation (4 hours).
Master, Space Technology.

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

Paz Sevilla Sierra.

- Universidad Complutense de Madrid.
Caracterización y propiedades de fármacos y sistemas afines (6 créditos ECTS).

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS / COURSES AND CONFERENCES

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

José González Carmona.

- *Propiedades Electrónicas del Grafeno*, Instituto Gregorio Millán, Universidad Carlos III de Madrid, Madrid, 18th of February 2009.

Jesús Fernando Barbero González

- *On the computation of black hole entropy in loop quantum gravity*, Warsaw (Poland), 16th of January 2009.
- *On the computation of black hole entropy in loop quantum gravity*, Instituto Gregorio Millán, Universidad Carlos III de Madrid, Madrid, 25th of February 2009.
- *On the computation of black hole entropy in loop quantum gravity*, Instituto de Física Fundamental CSIC, Madrid, 24th of April 2009.
- *Agujeros negros y física contemporánea*, Universidad de Alcalá de Henares, Madrid, 22nd of May 2009.
- *Explorando el Sistema Solar*, I.E.S. Valle Inclán, Torrejón de Ardoz (Madrid), 28th of May 2009.
- *On the computation of black hole entropy in loop quantum gravity*, Taipei (Taiwan), 20th of November 2009.
- *Loop quantum gravity from A to B*, Taipei (Taiwan), 2nd of December 2009.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Física de Agujeros Negros*, IES Miguel Hernández, Móstoles (Spain), 27th of March 2009.
- *Inhomogeneities in Loop Quantum Cosmology*, Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo (Canada), 27th of May 2009.

Gonzalo J. Olmo.

- *Modified Gravity: Lessons and Challenges*, Universidad de Valencia, Valencia, 9th of January 2009.
- *Past, Present, and Future of Palatini $f(R)$ Gravity*, Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid (Spain), 19th of February 2009.
- *Cosmic Speedup and Modified Gravity*, Universidad de Valladolid, Valladolid, 22th of May 2009.
- *The Invisible Universe (and Beyond)*, Outreach Colloquium, University of Wisconsin-Barron County, Rice Lake (USA), 11th of December 2009.
- *The Accelerating Universe: from Inflation to Cosmic Speedup*, University of Wisconsin-Milwaukee, Milwaukee (USA), 12th December 2009.

Luis J. Garay Elizondo

- *Emergent Black Holes*, King's College, London (United Kingdom), April 2009.

Tomasz Pawłowski.

- *Quantum Spacetime and the Big Bounce: An Introduction to Loop Quantum Cosmology*, Department of Theoretical Physics, University of Valencia (Spain), 1st of April 2009.

David Brizuela Cieza.

- *Teoría de perturbaciones a órdenes superiores en espaciotiempos esféricos y aplicaciones astrofísicas*, Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid (Spain), 27th of March 2009.
- *High-Order Perturbation Theory of Spherical Spacetimes*, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, Mexico D.F. (Mexico), 22th of April 2009.
- *Non-Linear Perturbation Theory on Spherical Spacetimes and Astrophysical Applications*, in Theoretical Astrophysics Seminars, University Eberhard Karls, Tuebingen (Germany), 6th of July 2009.
- *The Quantum Big Bounce for an Inhomogeneous Cosmological Model*, in Gravity Theory Seminars, University of Maryland (USA), 9th of September 2009.
- *The Quantum Big Bounce for an Inhomogeneous Cosmological Model*, in Fundamental Theory and International Loop Quantum Gravity Seminars, Institute for Gravitation and the Cosmos, Penn State University (USA), 4th of September 2009.

Mercedes Martín Benito.

- *Las estrellas: enormes reactores de fusión nuclear*, IES Miguel Hernández, Móstoles (Spain), 27th of March 2009.
- *Physical Evolution in Loop Quantum Cosmology*, Max Planck Institute for Gravitational Physics, Potsdam (Germany), 16th of July 2009.
- *Hybrid Quantum Cosmology: The Gowdy Model*, Institute for Theoretical Physics III of the Friedrich Alexander University (FAU), Erlangen-Nuernberg (Germany), 16th of December 2009.

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

José Barea Muñoz.

- *Energía Nuclear: ¿opción de futuro?*, CODELCO (Empresa estatal *Corporación del Cobre*), Calama (Chile), 15th of December 2009.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Aplicaciones de la teoría de matrices aleatorias a la estadística espectral de sistemas cuánticos*, Universidad Carlos III, Madrid (Spain), 22nd of May 2009.
- *Quantum wires driven by a laser-field: localization and conductance*, Universidad Complutense de Madrid (Spain), 22nd of April 2009.

Elvira Moya de Guerra Valgañón.

- *Física Nuclear y de Partículas*, 5th Course, 9 credits, Universidad Complutense de Madrid (Spain), October-June 2009.

Martín Alcorta Moreno.

- *Nuclear Structure of ^{12}C from 3-Body Break-up Studies in Complete Kinematics* (Invited Seminar), Centro de Física Nuclear da Universidade Lisboa, Lisboa (Portugal), 24th of April 2009.
- *Nuclear Structure of ^{12}C from 3-Body Break-up Studies in Complete Kinematics* (Seminar), Argonne National Laboratory, Chicago, Illinois (USA), 3rd of June 2009.

Mariano Carmona Gallardo.

- *Producción de ^7Be a partir de la reacción $^4\text{He}(^3\text{He},\gamma)^7\text{Be}$ con interés astrofísico" & Solución novedosa para la detección de radiación gamma y protones de alta energía con cristales centelladores phoswich*, (Invited Seminar), Centro de Microanálisis de Materiales de Madrid (CMAM), Madrid (Spain), 2nd of July 2009.

Carolina Romero Redondo.

- *Phase Shift Calculations for Three-Body Reactions Using Hyperspherical Adiabatic Methods*, INFN, Pisa, (Italy), 25th of June 2009.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano.

- *Ices everywhere: from the lab to the atmosphere and beyond*, Clare Hall Alumnii Meeting, San Sebastián, September 2009.

Víctor J. Herrero.

- *Introduction to the atmosphere.* Summer School “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).
- *Photochemistry in the atmosphere.* “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).

Isabel Tanarro.

- *Spectroscopic techniques 1: Detection of transmitted and emitted light.* Summer School “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).
- *Spectroscopic techniques 2: Detection of scattered light. Other detection methods.* Summer School “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).
- *Plasmas fríos moleculares. Sistemas altamente reactivos a baja temperatura.* Instituto de Ciencias Físicas. Universidad Nacional Autónoma de México. 9th of July 2009, Cuernavaca (Mexico).
- *El Plasma: Fundamentos y Aplicaciones.* Instituto de Enseñanza Secundaria Virgen de la Paloma, Madrid (Spain), 16 November 2009.

Belén Maté.

- Physical processes in the atmosphere, Summer School “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).

Oscar Gálvez González.

- *Application of models to tropospheric analysis,* Summer School “Spectroscopy of the Atmospheres” (SPECAT 09) y Curso de postgrado del CSIC, Utrech Network Universities y Universidad de Zaragoza. 29 June – 10 July 2009, Jaca (Spain).

Mirta Rodríguez Pinilla

- *Quantum polarization spectroscopy of correlations in ultracold bosonic and fermionic gases,* Facultad de Matemáticas, Universidad Complutense, 31st of March 2009.
- *Quantum spin polarization spectroscopy of correlations in ultracold gases,* Instituto de Física Fundamental CSIC, Madrid, 14th May 2009.
- *Quantum spin polarization spectroscopy of correlations in ultracold gases,* IFF, CSIC, 14th May 2009.
- *Quantum control of ultracold atoms and molecules,* Universidad País Vasco, Bilbao, 28th January 2010.

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

Santiago Arribas.

- *El Big Bang.* King’s College, April 2009, Madrid.

Luis Colina Robledo.

- *El telescopio especial James Webb.* VII Ciclo de Conferencias. Escuela de Ingeniería Aeronáutica, Universidad Politécnica, Madrid.

María Luisa Senent Diez.

- *Computational chemistry.* University of Burgos (Spain), June 2009.

Almudena Alonso Herrero.

- *El Nuevo Telescopio Espacial James Webb y su papel en el estudio de la formación y evolución de galaxias,* Ibercaja (Spain), 18th of May 2009.
- *Spitzer/IRS Spectral Mapping of Luminous Infrared Galaxies,* Rutherford Appleton Laboratory (UK), 4th of June 2009.

- *Spitzer/IRS Spectral Mapping of Luminous Infrared Galaxies*, University of Sheffield (UK), 22nd of July 2009.
- *Taller de Base de Datos de Spitzer*, Institute of Astronomy, Universidad Nacional Autónoma de México (Mexico), 5th-9th of October 2009.

Miguel Pereira Santaella.

- *Taller de Base de Datos de Spitzer*, Institute of Astronomy, Universidad Nacional Autónoma de México (Mexico), 5th-9th of October 2009.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- *Plasmonics Helps Spectroscopy in the Understanding of Biomolecules*, Biophysics Department, Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, November 5th 2009.

José A. Sánchez Gil.

- *Enhanced Raman & Fluorescence by metal nanostructures*, Laboratoire de Spectrometrie Ionique et Moleculaire, Université Claude Bernard Lyon 1 (France), 26th of November 2009.
- *Metal Nanoantennas: Plasmon Resonances & Enhanced Fluorescence*, ICD-Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique, Université de Technologie de Troyes (France), 3rd of December 2009.

Luis Díaz Sol.

- *Optical Emission Spectroscopy on Graphite Ablation Plumes*. University of West Bohemian, Faculty of Mechanical Engineering, Pilsen (Czech Republic), 3rd of November 2009.

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Novel Studies on the Nanostructure of Immisible Multilayered Polymers Using Synchrotron Radiation Techniques and Nanoindentation Methods*, Dpto. de Física de Materiales Nanoestructurados, Facultad de Física, Universidad de Viena (Austria), 3rd of June 2009.
- *On line structure formation in nanolayered polymers using X-ray scattering and nanoindentation methods*. Instituto de Polímeros y 'Composites', Universidad Técnica de Hamburgo (Germany), 14th of December 2009.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- *Máster de Ingeniería de Materiales*, Universidad de Alicante, 14th and 15th of May 2009.

Víctor Cruz Cañas

- *¿En qué trabaja un científico?* Semana de la Ciencia, I.E.S. "Calderón de la Barca", 25th of May 2009.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Reología de poliolefinas: Experimentos, teorías y simulación por ordenador*. Master en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 11th of March 2009.

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

José González Carmona.

- *Propiedades Electrónicas del Grafeno*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 11th of February 2009.
- *El grafeno como ejemplo de teoría de campos en $D = 2$* , part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 3rd of April 2009.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Relatividad general cuántica*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 3rd of April 2009.
- *Esas perversas funciones continuas*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 11th of November 2009.
- *¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 16th of November 2009.

Gonzalo J. Olmo.

- *Evaporación de Agujeros Negros*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 3rd of April 2009.

Luis J. Garay Elizondo.

- *Física de los agujeros negros*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of November 2009.

Tomasz Pawlowski.

- *Loop Quantum Cosmology*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 3rd of April 2009.
- *Before the Beginning: An Introduction to Loop Quantum Cosmology*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15th of June 2009.

Gil Jannes.

- *Perspectivas de gravedad cuántica*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th of November 2009.

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

M^a José García Borge.

- *El núcleo: un viaje al centro de la materia*, Semana de la Ciencia de la CAM, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 11th of November 2009.

Carlos Cruz de la Torre.

- Guided visit to the laboratory at Instituto Estructura de la Materia, Semana de la Ciencia, November 2009.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano Torres.

- *El universo en un cubito de hielo*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.
- *Advanced Spectroscopy in Chemistry Master Course, Erasmus Mundus Programme of the EU, member of the Organizing Committee*, with participation of seven European University sites, from 2005 on.
- *“Spectroscopy of the atmospheres (SPECAT 09)”* Summer school and CSIC, Utrech Network Universities and Universidad de Zaragoza post-graduate Course. 29th of June – 10th of July 2009, Jaca (Spain). *Director of the School.*

José Luis Doménech Martínez.

- *¿Cómo ayuda la espectroscopía láser al estudio de las atmósferas?*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

José M. Fernández Sánchez.

- *Espectroscopía Raman en chorros de gases*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Los Plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of November 2009. <http://hdl.handle.net/10261/8894>.

Raúl Z. Martínez Torres.

- *VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia* (organizer). Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 1-3rd of April 2009.

Oscar Gálvez González

- Laboratory Studies of Astrophysical Ices, Ciclo de Seminarios del Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 30th March 2009.
- *Hielo en el Universo: de la Tierra al medio interestelar*, IX Semana de la Ciencia, Madrid, 16th of November 2009.

Mirta Rodríguez Pinilla.

- *Condensados de Bose-Einstein: de átomos a moléculas*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

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

Santiago Arribas.

- *Participación del IEM en el JWST (James Webb Space Telescope) y E-ELT (European Extremely Large Telescope)*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, April 2009.
- *EL E-ELT (European Extremely Large Telescope): Los límites de la observación astronómica*, IX Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, November 2009.

Almudena Alonso Herrero and Luis Colina Robledo.

- *ESO/GTC CanariCam AGN Science Workshop*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, March 2009.
- *MIRI Integral Field Spectroscopy Workshop*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, June 2009.

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

Pedro Carmona.

- *Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja y Raman*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

Santiago Sánchez Cortés.

- *Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

Magna Santos Greve.

- *Fotodeposición y Ablación con Láseres en el Infrarrojo*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

Rogelio Rodríguez Oliveros.

- *Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1st of April 2009.

5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Victor Cruz (IEM-CSIC), Javier Martínez-Salazar (IEM-CSIC), Javier Ramos (IEM-CSIC). With Sergi Girona (Barcelona Supercomputing Center).

- 3rd *High Performance Computing in Molecular Simulations*. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1-2nd of October 2009.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- *Nanoindentación en polímeros*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 2nd of April 2009.

Aurora Nogales Ruiz.

- *VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular* (organizer), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 1-3rd of April 2009.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Jornada Científico Técnica: Módulo 1: Caracterización de Macromoléculas (polímeros, biopolímeros y proteínas) por Cromatografía de Permeación en Gel (GPC/SEC) y Triple Detección. Cromatógrafo de Triple Detección*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of October 2009.

Alejandro Sanz Parras.

- *El uso de grandes instalaciones científicas para el estudio de la física de la materia condensada blanda*, VI part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 2nd of April 2009.

Rafael Núñez Ramírez.

- *Microscopía Electrónica de Transmisión y Barrido: Presentación al Grupo de Usuarios del IEM*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of November 2009.

Jaime J. Hernández Rueda.

- *Aplicación de la microscopía de fuerza atómica al estudio de polímeros*, part of the “VI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 2nd of April 2009.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

Jesús Fernando Barbero González.

- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the Workshop *Black Holes and Loop quantum gravity* (Spain)
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XVIII International Fall Workshop on Geometry and Physics*, Benasque (Spain).

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops 2009*. Beijing (China).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Loop Quantum Gravity, Quantum Gravity and Spin Foams* session of the *12th Marcel Grossman Meeting*. Paris (France).

Gonzalo J. Olmo.

- 4th Award of the Gravity Research Foundation for the Essay “*Inflation, Quantum Fields, and CMB Anisotropies*” by I. Agulló, J. Navarro-Salas, Gonzalo J. Olmo, and L. Parker.

Tomasz Pawłowski.

- The article by W. Kaminski, J. Lewandowski and T. Pawłowski, “*Physical time and other conceptual issues of quantum gravity on the example of loop quantum cosmology*”, *Class. Quant. Grav.* **26**, 035012 (2009), selected for Editorial Highlights of Classical and Quantum Gravity in the period 2008-2009.

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

M^a José García Borge.

- Organizer of the *ISOLDE Workshop*, CERN, 18-21 November, Geneva (Switzerland).
- President of the *Collaboration Committee ISOLDE* (CERN), Geneva (Switzerland).
- Spanish expert representative in the Nuclear Physics Committee in the *European Science Foundation* (NUPECC).
- Member of the Experts Committee in the *Programme Advisory Committee* (PAC) of the Laboratori Nazionali del Sud (Catania, Italy).

F. Javier Bermejo.

- Director of ESS-Bilbao -*Spanish Site of the European Spallation Source*-.
- Member of the *International Advisory Board*, “Conferences on Liquid and Amorphous Metals”.

Carlos Cabrillo García.

- Member of the *Scientific Committee* of the Collage 6, “Structure and dynamics of liquid and glasses” of Institute Laue Langevin (ILL, Grenoble, France).
- Member of the *Scientific Committee of the Conference Series FisEs*.

Olof Tengblad.

- Expert of evaluation of projects ERC IDEAS in the *European Research Council*, (Brussels).

Elvira Moya de Guerra Valgañón.

- President of the *National Committee of Evaluation of Research Activity* (CNEAI) of Physics and Mathematics, Madrid (Spain).
- Vicepresident of the *Acceditation Committee of Science Professors* (ANECA), Madrid (Spain).
- Medal of Merit in Research, public outreach and teaching of Physics of *La Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Editorial Board* of The Annals of the Academy of Romanian Scientists (Physics Series), March 2009.
- Member of the *Editorial Board* of Revista Española de Física.
- Scientific Advisor of the *Agencia Andaluza de Evaluacion de la Calidad y Acreditacion Universitaria*.
- *Advisory Board* of the Workshop on Hadron Dynamics.

Ibón Bustinduy.

- Member of the *Infrastructures Committee of ESSS* (Sweden site of the European Spallation Source).

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo.

- Member of the Scientific Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.
- Adjunct Professor of the Lethbridge University (Lethbridge, 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.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *High Resolution Molecular Spectroscopy Symposium*.

Víctor José Herrero.

- Secretary of the Spanish Alexander von Humboldt Association.
- Member of the board of directors of the *Asociación Española de Vacío* (ASEVA).

- Vicepresident of the Board of Directors of *Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular* of the RSEF.

Salvador Montero Martín.

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

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the Board of Directors of the *Asociación Española de Vacío* (ASEVA).
- Member of the Board of the *Grupo Especializado de Plasmas* of the RSEFQ.

Belén Maté.

- Vicepresident of the Spectroscopy Committee of the *Sociedad Española de Óptica*.

Guzmán Tejada 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.
- CoI of the phase A study of instrument HARMONI for the E-ELT.
- Member of the JWST/NIRSpec Instrument Science Team.

Luis Colina Robledo.

- Member of the Centre de la Recherche Astrophisique de Lyon (CRAL-CNRS) Visiting 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.
- Member of the EELT/HARMONI Instrument Science Team.

Almudena Alonso Herrero.

- Member of the European Southern Observatory Time Allocation Committee.
- Member of the GTC/CanariCam Instrument Science Team.
- Member of the JWST/MIRI Instrument Science Team.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- Member of the Editorial Board of the *Vibrational Spectroscopy* journal.
- President of the Spanish Committee of Spectroscopy of SEDOPTICA.

Paz Sevilla Sierra

- Member of the ECSBM (European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules) European Committee.
- Member of the *Board of Directors* of the Spanish Optical Society SEDOPTICA.
- Member of the *Board of Directors* of the Spanish Committee of Spectroscopy.

P. Sevilla, R.De-Llanos, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés and J.V. García-Ramos.

- "Fluorescence study of the interaction between antitumoral drug emodin and bovine serum albumin in presence of silver nanoparticles" Poster awarded for the "high scientific level" in the 13th European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules, Palermo (Italy), August 2010.

L. Guerrini.

- *Premio Extraordinario de Doctorado* de la Universidad Autónoma de Madrid.

5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Francisco J. Baltá Calleja.

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

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 *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

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

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

5.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Reuniones de transferencia de tecnología

Meeting attendees: Amelia Linares Dos Santos and Tiberio A. Ezquerro.

Collaboration: **Grupo Antolín Ingeniería S.A.**

Place: Burgos

Date: October, 2009.

Meeting attendees: Nuria Robleo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez de Salazar.

Collaboration: **Dow Chemicals Ibérica, S.L.**

Place: Madrid.

Date: 22th of May, 2009.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Speaker: Nuria Robledo Alvaro.

Title: Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. I.

Colaboration: IEM/Dow Chemical Ibérica.

Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Dates: 24th of May 2009.

Informes de transferencia tecnológica

Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar.

Propiedades elongacionales de polietilenos obtenidos mediante hilado de fibra en fundido.

Repsol-YPF (May 2009).

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco vega Borrego y Javier Martínez de Salazar.

Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. I.

Dow Chemicals Ibérica (June 2009).

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

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

Gonzalo J. Olmo.

- *Ciencia de papel*, blog de ciencia en el periódico de internet <http://www.gentedigital.es>.

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

Jorge Dukelsky.

- Supervisor of Postdoc activities:
 - ✓ Interplay between quantum entanglement and quantum chaos in strongly correlated systems, Armando Relaño, “*Juan de la Cierva Program*”, (June 2006-May 2009).
 - ✓ Propiedades de transporte electrónico en sistemas fuertemente correlacionados de baja dimensionalidad, Rafael Molina, “*I3P Program*” (September 2006-August 2009).
 - ✓ New computational tools for the study of quantum correlations in nuclear matter, Stefan Rombouts, “*Marie-Curie Intra-European Fellowship*” (December 2008-November 2010).

José Barea Muñoz.

- Participation in teaching of the subject Técnicas Nucleares for the Bachelor degree of Physics, *University of Seville* (Spain).
- Participation in teaching of the subject Técnicas Experimentales II for the Bachelor degree of Physics, *University of Seville* (Spain).

Ricardo Domínguez Reyes.

- Participation in 15 teaching hours of laboratory for the subject “Physics I” at the Chemistry degree, *Universtity Complutense of Madrid* (Spain).

Ángel Perea.

- Meeting to analyze the implementation of the technology LAPD in phoswich detectors, *University of Barcelona* (Spain), February 2009.
- Design of detector supports, setup and operation of the experiment acquisition system. Electronic equipment setup, *European Synchrotron Radiation Facility*, 6-9th of July, Grenoble (France).

Carlos Cruz de la Torre.

- Setup and take data for experiments, *Centro de Microanálisis de Materiales* (CMAM), Madrid (Spain), 2-6th & 16- 20th of March, 19-23rd of May, 18- 24th of June and 17-30th of November 2009.

- Setup and operation of the experiment acquisition system. Electronic equipment setup. Experimental data proceeding, *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)*, Grenoble (Switzerland), 6- 9th of July 2009.
- Setup and data gathering experiment. *Instituto Tecnológico y Nuclear (ITN)*. Lisbon (Portugal), 1-5th of November 2009.
- Laboratory practices at *Instituto de Estructura de la Materia*, CSIC for students of the Máster Erasmus Mundus in “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”.
- Take a course “Administración avanzada en Linux” (20 hours), CSIC-UAM, 23-27th of November 2009.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades asociadas

- Unidad Asociada “Química Física Molecular” entre el IEM, CSIC (responsable Víctor J. Herrero) y el Dpto. de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (responsable F. Javier Aoiz), renovada por el periodo 2009-2012.
- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Rafael Escribano) y el Dpto. de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén (responsable M. Fernández), renovada por el periodo 2007-2010.

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

Unidades asociadas

- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Santiago Sánchez Cortés) y el Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular (Departamento de Química Física, Universidad de Málaga (responsable J.C. Otero), renovada por el periodo 2009-2012.
- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Concepción Domingo Maroto) y el Dpto. de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía, Universidad de Valladolid (responsable J.A. de Saja), renovada por el periodo 2009-2012.

5.6.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities

Francisco J. Baltá Calleja. Short stays:

- Dpto. de Física de Materiales Nanoestructurados, Facultad de Física, Universidad de Viena, Austria, 30th of May to 4th of June 2009.
- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 9-14th of December 2009.

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 4-7th of February 2009.
- DESY/HASYLAB, Hamburgo, 4-7th of March 2009.
- Instituto Laue-Langevin, France, 28-30th of March 2009.
- Review Panel Committee, SOLEIL French Synchrotron (participation as member of the Committee), Paris (France), 27-29th of April 2009.
- Panel Review Committee, HASYLAB (participation as member of the Committee), Hamburg, Germany, 7th and 8th of May 2009.
- Instituto Laue-Langevin (realización de medidas en el reactor nuclear), Grenoble, France, 26-28th of May 2009.
- Review Panel Committee, SOLEIL French Synchrotron (participation as member of the Committee), Paris, France, 17-19th of June 2009.
- Instituto Laue-Langevin (realización de medidas en el reactor nuclear), Grenoble, France, 26-28th of May 2009.
- Instituto Laue-Langevin (realización de medidas en el reactor nuclear), Grenoble, France, 20-25th of October 2009.

- Laboratorio del reactor nuclear FRMII, Garching, Munich, Germany, 27th of November to 1st of December 2009.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Reunión del Comité Europeo de la Federación de Polímeros (participation as member of the Committee), Graz, Austria, 11-15th of July 2009.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- ESRF, Experimentación en ID 13, Grenoble, France, 4-9th of February 2009.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 4-7th of March 2009.
- ESRF, Experimentación en la línea BM16, Grenoble, France, 16-20th of April 2009.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 20-25th of October 2009.

Fernando Ania García. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 8-13th of July 2009.

M^a Esperanza Cagiao Escotado. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 9-14th of December 2009.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 8-13th of July 2009.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- ESRF, Grenoble, France, 5-9th of February 2009.
- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 4-7th of March 2009.
- Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain, 10th of July 2009. [Reunión en el marco de la Unidad Asociada UVA-IEM.]
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 20-25th of October 2009.

Aurora Nogales Ruiz. Short stays:

- Instituto Laue-Langevin, France, 28-30th of March 2009.
- ESRF, Experimentación en la línea BM16, Grenoble, France, 16-20th of April 2009.
- Laboratorio del reactor nuclear FRMII, Garching, Munich, Germany, 23-27th of November 2009.

Alejandro Sanz Parras. Short stays:

- ESRF, Experimentación en la línea BM16, Grenoble, France, 16-20th of April 2009.
- Instituto Laue-Langevin, Grenoble, France, 20-25th of October 2009.

Carmen Arribas Arribas. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 8-13th of July 2009.

Jaime Javier Hernández Rueda. Short stays:

- ESRF, Grenoble, France, 5-9th of February 2009.
- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 4-7th of March 2009.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 20-25th of October 2009.

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

CHAPTER 6
PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION

6.1 PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI / ISI PUBLICATIONS

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

1. I. Agulló, J. Navarro-Salas, G. J. Olmo and L. Parker.
Revising the Predictions of Inflation for the Cosmic Microwave Background Anisotropies.
Physical Review Letters **103**, 061301 (2009).
2. I. Agulló, J. Navarro-Salas, G. J. Olmo and L. Parker.
Insensitivity of Hawking Radiation to an Invariant Planck-Scale Cutoff.
Physical Review D **80**, 047503 (2009).
3. I. Agulló, J. F. Barbero G., J. Díaz Polo, E. Fernández Borja and E.J.S. Villaseñor.
The combinatorics of the $SU(2)$ black hole entropy in loop quantum gravity.
Physical Review D **80**, 084006 (2009).
4. I. Agulló, J. Navarro-Salas, G. J. Olmo and L. Parker.
Inflation, Quantum Fields, and CMB Anisotropies.
General Relativity and Gravitation **41**, 2301 (2009).
5. I. Agulló, J. Navarro-Salas, G. J. Olmo and L. Parker.
Inflation, Quantum Fields, and CMB Anisotropies.
International Journal of Modern Physics D **18**, 2329-2335 (2009).
6. J. F. Barbero G. and E.J.S. Villaseñor.
On the Computation of Black Hole Entropy in Loop Quantum Gravity.
Classical and Quantum Gravity **26**, 035017 (2009).
7. J.F. Barbero G., J. Lewandowski and E.J. S. Villaseñor.
Flux-area operator and black hole entropy.
Physical Review D **80**, 044016 (2009).
8. C. Barceló, L. J. Garay and G. Jannes.
Sensitivity of Hawking Radiation to Superluminal Dispersion Relations.
Physical Review D **79**, 024016 (2009).
9. C. Barragán, G. J. Olmo and H. Sanchís-Alepuz.
Bouncing Cosmologies in Palatini $f(R)$ Gravity.
Physical Review D **80**, 024016 (2009).
10. D. Brizuela and J. M. Martín-García.
Hamiltonian Theory for the Axial Perturbations of a Dynamical Spherical Background.
Classical and Quantum Gravity **26**, 015003 (2009).
11. D. Brizuela, J. M. Martín-García and G. A. Mena Marugán.
xPert: Computer Algebra for Metric Perturbation Theory.
General Relativity and Gravitation **41**, 2415 (2009).
12. D. Brizuela, J. M. Martín-García and M. Tiglio.
A Complete Gauge-Invariant Formalism for Arbitrary Second-Order Perturbations of a Schwarzschild Black Hole.
Physical Review D **80**, 024021 (2009).
13. J. Cortez, G. A. Mena Marugán, R. Serôdio and J. M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock Quantization of a Free Scalar Field on S^1 with Time Dependent Mass.
Physical Review D **79**, 084040 (2009).

14. Daniel Gómez Vergel and Eduardo J. S. Villaseñor.
The time-dependent quantum harmonic oscillator revisited: Applications to Quantum Field Theory
Annals of Physics **324**, 1360 (2009).
15. J. González, F. Guinea and J. Herrero.
Propagating, Evanescent, and Localized States in Carbon Nanotube-Graphene Junctions.
Physical Review B **79**, 165434 (2009).
16. J. González and E. Perfetto.
Many-Body Effects on Flexural Phonons in Graphene.
New Journal of Physics **11**, 095015 (2009).
17. W. Kaminski, J. Lewandowski and T. Pawłowski.
Physical Time and Other Conceptual Issues of Quantum Gravity on the Example of Loop Quantum Cosmology.
Classical and Quantum Gravity **26**, 035012 (2009).
18. W. Kaminski, J. Lewandowski and T. Pawłowski.
Quantum Constraints, Dirac Observables and Evolution: Group Averaging versus the Schrödinger Picture in LQC.
Classical and Quantum Gravity **26**, 245016 (2009).
19. M. Martín-Benito, G. A. Mena Marugán and T. Pawłowski.
Physical Evolution in Loop Quantum Cosmology: The Example of Vacuum Bianchi I.
Physical Review D **80**, 084038 (2009).
20. M. Martín-Benito, G. A. Mena Marugán, and J. Olmedo.
Further Improvements in the Understanding of Isotropic Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **80**, 104015 (2009).
21. G. A. Mena Marugán and M. Martín-Benito.
Hybrid Quantum Cosmology: Combining Loop and Fock Quantizations.
International Journal of Modern Physics A **24**, 2820 (2009).
22. G. J. Olmo, H. Sanchís-Alepuz and S. Tripathi.
Dynamical Aspects of Generalized Palatini Theories of Gravity.
Physical Review D **80**, 024013 (2009).
23. G. J. Olmo and P. Singh.
Covariant Effective Action for Loop Quantum Cosmology a la Palatini.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1**, 030 (2009).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

24. J. Fernando Barbero G.
Black hole entropy in loop quantum gravity: the role of internal symmetries.
Journal of Physics: Conference Series **175**, 012005 (2009).
25. J. Fernando Barbero G., Iñaki Garay and Eduardo J. S. Villaseñor.
Semiclassical states for a symmetry reduced gravitational system.
AIP Conference Proceedings **1122**, 185-188 (2009).
26. C. Barceló, L. J. Garay and G. Jannes.
How Sensitive is Hawking Radiation to Superluminal Dispersion Relations?
American Institute of Physics Conference Proceedings **1122**, 304-307 (2009).
27. D. Brizuela.
Non-linear perturbations of a spherically collapsing star.
Editor(s): K.E. Kunze, M. Mars and M.A. Vazquez Mozo.
Physics and Mathematics of Gravitation.
AIP Conference Proceedings **1122**, 205-208 (2009).

28. Daniel Gómez Vergel and Eduardo J. S. Villaseñor.
Functional description of $S1xS1$ $S3$ Gowdy cosmologies.
Journal of Physics: Conference Series **175**, 012010 (2009).
29. G. A. Mena Marugán,
A Brief Introduction to Loop Quantum Cosmology.
American Institute of Physics Conference Proceedings **1130**, 89-100 (2009).

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

30. L. Acosta, M.A.G. Álvarez, M.V. Andrés, M.J.G. Borge, M. Cortés, J.M. Espino, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, A. Maira, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, F. Pérez-Bernal, E. Reillo, D. Rodríguez, K. Rusek, A.M. Sánchez Benítez and O. Tengblad.
Signature of a strong coupling with the continuum in $^{11}\text{Be} + ^{120}\text{Sn}$ scattering at the Coulomb barrier.
The European Physical Journal A **42**, 461-464 (2009).
31. 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. Fernandez-Vazquez, C. Forssén, H.O.U. Fynbo, H. Geissel, M. Hellström, G. Ickert, K.L. Jones, B. Jonson, A. Kliemkiewicz, J.V. Kratz, R. Kulesa, 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. Prokopowic, 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.
Properties of the ^7He ground state from ^8He neutron Knockout.
Physics Letters B **679**, 191-196 (2009).
32. M. Alcorta, O. Kirsebom, M.J.G. Borge, H.O.U. Fynbo, K. Riisager and O. Tengblad.
A complete kinematics approach to study multi-particle final state reactions.
Nuclear Instruments and Methods A **605**, 318-325 (2009).
33. R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, E. Garrido, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, O.S. Kirsebom.
Three-Body Decays: Structure, Decay Mechanism and Fragment Properties.
Few-body Systems **45**, 149-152 (2009).
34. A.N. Antonov, M.V. Ivanov, M.B. Barbaro, J.A. Caballero and E. Moya de Guerra.
Longitudinal and transverse scaling functions within the Coherent Density Fluctuation Model.
Physical Review C **79**, 044602 (2009).
35. P. Barletta, C. Romero-Redondo, A. Kievsky, M. Viviani, E. Garrido.
Integral Relations for Three-Body Continuum States with the Adiabatic Expansion.
Physical Review Letters **103**, 090402 (2009).
36. L. Cáceres, M. Górska, A. Jungclaus, M. Pfützner, H. Grawe, F. Nowacki, K. Sieja, S. Pietri, D. Rudolph, Z. Podolyak, P.H. Regan, E. Werner-Malento, P. Detistov, S. Lalkovski, V. Modamio, J. Walker, K. Andgren, P. Bednarczyk, J. Benlliure, G. Benzoni, A.M. Bruce, E. Casarejos, B. Cederwall, F.C.L. Crespi, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Gerl, J. Grebosz, B. Hadinia, M. Hellstrom, R. Hoischen, G. Ilie, A. Khaplanov, M. Kmiecik, I. Kojouharov, R. Kumar, N. Kurz, K. Langanke, A. Maj, S. Mandal, F. Montes, G. Martinez-Pinedo, S. Myalski, G. Simpson, S.J. Steer, S. Tashenov y O. Wieland.
Spherical proton-neutron structure of isomeric states in ^{128}Cd .
Physical Review C **79**, 011301(R) (2009).
37. C.Aa Diget, F.C. Barker, M.J.G. Borge, R. Boutami, P. Dendoven, T. Eronen, S. P. Fox, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, J. Huikari, S. Hyldegaard, H. Jeppesen, A. Jokinen, B. Jonson, A. Kankainen, I. Moore, A. Nieminen, H. Penttilä, V.F.E. Pucknell, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, Y. Wang, K. Wilhelmsen and J. Äystö.
Breakup channels for ^{12}C triple- α continuum states.
Physical Review C **80**, 034316 (2009).

38. J. Dukelsky, J. Okolowicz, y M. Ploszajczak.
Coalescence of two exceptional points in the anti-hermitian 3-level pairing model.
International Journal of Modern Physics E **18(10)**, 2030-2034 (2009).
39. B. Errea, J. Dukelsky y G. Ortiz.
Breached pairing in trapped three-color atomic Fermi gases.
Physical Review A **79**, 051603(R) (2009).
40. S. Espana, J.L. Herraiz, E. Vicente, J.J. Vaquero, J. Desco and J.M. Udias.
PeneloPET, a Monte Carlo PET simulation tool based on PENELOPE: features and validation.
Physics in Medicine and Biology **54** (6), 1723-1742 (2009).
41. D.V. Fedorov, A.S. Jensen, M. Thogersen, E. Garrido, R. de Diego.
Calculating Few-body Resonances Using an Oscillator Trap.
Few-body Systems **45**, 191-195 (2009).
42. H.O.U. Fynbo, R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, O.S. Kirsebom, D.V. Fedorov, E. Garrido.
Three-body decays and R-matrix analyses.
Physical Review C **79**, 054009 (2009).
43. M.K. Gaidarov, G.Z. Krumova, P. Sarriguren, A.N. Antonov, M.V. Ivanov, E. Moya de Guerra.
Momentum distributions in medium and heavy exotic nuclei.
Physical Review C **80**, 054305.1-13 (2009).
44. A.B. Garnsworthy, P.H. Regan, S. Pietri, Y. Sun, F.R. Xu, D. Rudolph, M. Górska, L. Cáceres, Zs. Podolyak, S.J. Steer, A. Heinz, F. Becker, P. Bednarczyk, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Gerl, H. Grawe, J. Grebosz, A. Kelic, I. Kojouharov, N. Kurz, F. Montes, W. Prokopowicz, T. Saito, H. Schaffner, S. Tachenov, E. Werner-Malento, H.J. Wollersheim, G. Benzoni, B. Blank, C. Brandau, A.M. Bruce, F. Camera, W.N. Catford, I.J. Cullen, Zs. Dombradi, E. Estevez, W. Gelletly, R. Hoischen, G. Ilie, J. Jolie, G.A. Jones, A. Jungclaus, M. Kmiecik, F.G. Kondev, T. Kurtukian-Nieto, S. Lalkovski, Z. Liu, A. Maj, S. Myalski, M. Pfützner, S. Schwertel, T. Shizuma, A.J. Simons, P.M. Walker y O. Wieland.
Isomeric states in neutron-deficient $A \sim 80-90$ nuclei populated in the fragmentation of ^{107}Ag
Physical Review C **80**, 064303 (2009).
45. E. Garrido, R. de Diego, C. Romero-Redondo, D.V. Fedorov, A.S. Jensen.
Few-Body Reactions in Nuclear Astrophysics.
Few-body Systems **45**, 133-136 (2009).
46. M. Górska, L. Cáceres, H. Grawe, M. Pfützner, A. Jungclaus, S. Pietri, E. Werner-Malento, Z. Podolyak, P.H. Regan, D. Rudolph, P. Detistov, S. Lalkovski, V. Modamio, J. Walker, T. Beck, P. Bednarczyk, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Gerl, J. Grebosz, R. Hoischen, I. Kojouharov, N. Kurz, W. Prokopowicz, H. Schaffner, H. Weick, H.J. Wollersheim, K. Andgren, J. Benlliure, G. Benzoni, A.M. Bruce, E. Casarejos, B. Cederwall, F.C.L. Crespi, B. Hadinia, M. Hellström, G. Ilie, J. Jolie, A. Khaplanov, M. Kmiecik, R. Kumar, A. Maj, S. Mandal, F. Montes, S. Myalski, G. Simpson, S.J. Steer, S. Tashenov, O. Wieland, Zs. Dombradi, P. Reiter y D. Sohler.
Evolution of the $N=82$ shell gap below ^{132}Sn inferred from core excited states in ^{131}In
Physics Letters B **672**, 313 (2009).
47. S. Hyldegaard, C.Aa Diget, M.J.G. Borge, R. Boutami, P. Dendoven, T. Eronen, S. Fox, L. M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, J. Huikari, H.B. Jeppesen, A. Jokinen, B. Jonson, A. Kankainen, O. Kirsebom, I. Moore, G. Nyman, H. Penttilä, K. Peräjärvi, R. Raabe, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, Y. Wang, K. Wilhelmsen and J. Äystö.
Branching ratios to unbound ^{12}C states from ^{12}N and ^{12}B β -decays.
Physical Review C **80**, 044304 (2009).
48. S. Hyldegaard, C. Forssén, M. Alcorta, F.C. Barker, B. Bastin, M.J.G. Borge, R. Boutami, S. Brandenburg, J. Büscher, P. Dendoven, C.Aa Diget, P. Van Duppen, T. Eronen, S. Fox, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, J. Huikari, M. Huyse, H. Jeppesen, A. Jokinen, B. Jonson, K. Jungmann, A. Kankainen, O. Kirsebom, M. Madurga, I. Moore, P. Navrátil, T. Nilsson, G. Nyman, G.J.G. Onderwater, H. Penttilä, K. Peräjärvi, R. Raabe, K. Riisager, S. Rinta-Antila, A. Rogachevskiy, A. Saastamoinen, M. Sohani, O. Tengblad, E. Traykov, J. P. Vary, Y. Wang, K. Wilhelmsen H. W. Wilschut and J. Äystö.
Precise branching ratios to unbound ^{12}C states from ^{12}N and ^{12}B β -decays.
Physics Letters B **678**, 459-464 (2009).

49. L. Isaev, G. Ortiz, and J. Dukelsky.
Hierarchical mean-field approach to the J_1 - J_2 Heisenberg model on a square lattice.
Physical Review B **79**, 024409 (2009).
50. L. Isaev, G. Ortiz and J. Dukelsky.
Local physics of magnetization plateaux in the Shastry-Sutherland model.
Physical Review Letters **103**, 177201 (2009).
51. Jungclauss, T.R. Rodríguez, J.L. Egido y la colaboración RISING.
Isomer spectroscopy and shell structure around doubly-magic ^{132}Sn
Acta Physica Polonica B **40**, 427 (2009).
52. O.S. Kirsebom, M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, C.A. Diget, R. Dominguez-Reyes, L. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, G. García, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, P. Joshi, M. Madurga, A. Maria, A. Muñoz, T. Nilsson, G. Nyman, D. Obradors, A. Perea, K. Riisager and O. Tengblad and M. Turrión.
Observation of γ -delayed 3α breakup of the 15.11 and 12.71 MeV states in ^{12}C .
Physics Letters B **680**, 44-49 (2009).
53. G.G. Kiss, P. Mohr, Zs. Fülöp, D. Galaviz, Gy. Gyürky, Z. Elekes, E. Somorjai, A. Kretschmer, K. Sonnabend, A. Zilges, and M. Avrigeanu.
High precision $^{89}\text{Y}(\alpha, \alpha)^{89}\text{Y}$ scattering at low energies.
Physical Review C **80**, 045807 (2009).
54. I. Krivchikov, I. V. Sharapova, O. A. Korolyuk, and O. O. Romantsova, F.J. Bermejo.
Experimental evidence of the role of quasilocalized phonons in the thermal conductivity of simple alcohols in orientationally ordered crystalline phases
Low Temperature Physics **35**, 891-897 (2009).
55. M. Madurga, M.J.G. Borge, M. Alcorta, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, B. Jonson, O. Kirsebom, T. Nilsson, G. Nyman, A. Perea, K. Riisager, O. Tengblad, E. Tengborn and J van der Walle.
Kinematic identification of the β t branch in the decay of ^{11}Li .
The European Physical Journal A **42**, 415 (2009).
56. M. Madurga, M.J.G. Borge, M. Alcorta, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, B. Jonson, O. Kirsebom, T. Nilsson, G. Nyman, A. Perea, K. Riisager, O. Tengblad, E. Tengborn and J. van der Walle.
Evidence of a new state in ^{11}Be observed in the ^{11}Li decay.
Physics Letters B **677(5)**, 255–259 (2009).
57. P. Maierbeck, R. Gernhäuser, R. KRücken, T. Kröll, H. Alvarez-Pol, F. Aksouh, T. Aumann, K. Behr, E.A. Benjamin, J. Benlliure, V. Bildstein, M. Böhmer, K. Boretzky, M.J.G. Borge, A. Brünle, A. Bürger, M. Caamaño, E. Casarejos, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, J. Enders, K. Eppinger, T. Faestermann, J. Friese, L. Fabbietti, M. Gascón, H. Geissel, J. Gerl, M. Gorska, P.H. 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, S. Winkler, B.A. Brown, T. Otsuka, J. Tostevin, W.D.M. Rae.
Structure of ^{55}Ti from relativistic one-neutron Knockout.
Physics Letters B **675**, 22-27 (2009).
58. H. Mach, A.M. Baluyut, E. Ruchowska, U. Koster, L.M. Fraile, R. Boutami, H. Bradley, N. Braun, C. Fransen, J. Jolie, J. Nyberg and V. Ugryumov
Structure of heavy Fe nuclei at the point of transitions at N similar to 37
Acta Physica Polonica B **40** (3), 477-480 (2009).
59. I.Matea, N. Adimi, B. Blank, G. Cachel, J. Giovinozzo, M.J.G. Borge, R. Dominguez-Reyes, O. Tengblad and J.-C. Thomas.
The Silicon Cube detector.
Nuclear Instruments and Methods A **607**, 576-580 (2009).

60. V. Modamio, A. Jungclaus, Zs. Podolyak, Y. Shi, F.R. Xu, A. Algora, D. Bazzacco, D. Escrig, L. M. Fraile, S. Lenzi, N. Marginean, T. Martinez, D.R. Napoli, R. Schwengner and C.A. Ur.
Identification of Yrast high-K intrinsic states in ^{188}Os .
Physical Review C **79**, 024310 (2009).
61. O. Moreno, R. Alvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, F. Simkovic, A. Faessler.
Single and low-lying states dominance in two-neutrino double-beta decay.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **36**, 015106.1-19 (2009).
62. O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udias, T.W. Donnelly, I. Sick.
Nuclear isospin mixing and elastic parity-violating electron scattering.
Nuclear Physics A **828**, 306-332 (2009).
63. R. A. Molina, J. Dukelsky y P. Schmitteckert.
Crystallization of trions in $SU(3)$ cold-atom gases trapped in optical lattices.
Physical Review A **80**, 013616 (2009).
64. P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, and J. E. Garcia-Ramos.
Decoherence due to an excited-state quantum phase transition in a two-level boson model.
Physical Review A **80**, 032111 (2009).
65. A A Raduta, F D Aaron, E Moya de Guerra and Amand Faessler.
Phenomenological description of the states 0^+ and 2^+ in some even-even nuclei.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **36**, 055101 (2009).
66. A.A. Raduta, C.M. Raduta, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren.
Remarks on monopole charge properties within the Generalized Coherent State Mode.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **36**, 015114.1-21 (2009).
67. L.M. Robledo, R. Rodríguez-Guzmán, P. Sarriguren.
Role of triaxiality in the ground-state shape of neutron-rich Yb, Hf, W, Os and Pt isotopes.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **36**, 115104.1-19 (2009).
68. M. Rodríguez-Gallardo, J.M. Arias, J. Gómez-Camacho, A.M. Moro, I.J. Thompson, J.A. Tostevin.
Four-body continuum-discretized coupled-channels calculations.
Physical Review C **80**, 051601 (2009).
69. J. Rotureau, N. Michel, W. Nazarewicz, M. Płoszajczak, y J. Dukelsky.
Density matrix renormalization group approach to two-fluid open many-fermion systems.
Physical Review C **79**, 014304 (2009).
70. N. Sandulescu, B. Errea y J. Dukelsky.
Isovector proton-neutron pairing with particle number projected BCS.
Physical Review C **80**, 044335 (2009).
71. P. Sarriguren.
Weak interaction rates for Kr and Sr waiting-point nuclei under rp-process conditions.
Physics Letters B **680**, 438-442 (2009).
72. P. Sarriguren.
Shape mixing and beta-decay properties of neutron-deficient Kr and Sr isotopes.
Physical Review C **79**, 044315.1-7 (2009).
73. R. Schwengner, G. Rainovski, H. Schnare, A. Wagner, S. Frauendorf, F. Donau, A. Jungclaus, M. Hausmann, O. Yordanov, K.P. Lieb, D.R. Napoli, G. De Angelis, N. Marginean, F. Brandolini y C. Rossi Alvarez.
Magnetic dipole sequences in ^{83}Rb .
Physical Review C **80**, 044305 (2009).
74. K. Van Houcke, S.M.A. Rombouts, K. Heyde and Y. Alhassid.
Microscopic calculation of symmetry projected nuclear level densities.
Physical Review C **79**, 024302 (2009).

75. M. Zuriaga, L.C. Pardo, P. Lunkenheimer et al.
New Microscopic Mechanism for Secondary Relaxation in Glasses
Physical Review Letters **103**, 075701 (2009).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

76. J. Santos, R. A. Molina, J. Ortigoso, M. Rodríguez.
Controlled localization of interacting bosons in a disordered optical lattice.
Physical Review A. **80**, 063602 (2009).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

77. M. Alcorta, M.J.G. Borge, M. Cubero, R. Dominguez-Reyes, L. Fraile, D. Galaviz, M. Madurga, A. Maria, D. Obradors, A. Perea, O. Tengblad, M. Turrion.
Nuclear Structure of ^{12}C from breakup studies in complete kinematics.
Proceedings of the International Conference on Nuclear Structure and Dynamics 2009.
AIP Conference Proceedings 1165 (2009) 27-30.
78. R. Enparantza, L. Uriarte, F.J. Bermejo et al.
A Test Stand for Ion Sources of Ultimate Reliability
Negative Ions, Beams and Sources: Proceedings of 1st International Symposium on Negative Ions, Beams and Sources.
AIP Conference Proceedings 1097 (2009) 461-469.
79. J. E. Garcia-Ramos, J. M. Arias, J. Dukelsky, P. Pérez-Fernández y A. Relaño.
Decoherence as a Signature of an Excited State Quantum Phase Transition in Two Level Boson Models.
Proceedings of the International Conference on Nuclear Structure and Dynamics 2009.
AIP Conference Proceedings 1165 (2009) 207-210.
80. A.M. Moro, L. Acosta, J.M. Arias, M.J.G. Borge, D. Escrig, J. Gómez-Camacho, I. Martel, M. Rodríguez-Gallardo, A. M. Sánchez-Benítez and O. Tengblad.
Understanding ^6He induced reactions at energies around the Coulomb barrier.
Nuclear Physics 2008 - XXXI Workshop on Nuclear Physics in Brazil.
AIP Conference Series 1139 (2009) 3-10.
81. P. Sarriguren, R. Rodríguez-Guzman, L.M. Robledo.
Nuclear shape transitions from a microscopic approach.
Proceedings of the Int. Conference on Nuclear Structure and Dynamics.
AIP Conference Proceedings 1165 (2009) 203-206.

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

82. J. Durá, R. de Nalda, G. A. Amaral, L. Bañares.
Imaging transient species in the femtosecond A-band photodissociation of CH_3I .
Journal of Chemical Physics **131**, 134311 (2009).
83. O. Gálvez, P.C. Gómez and L.F. Pacios.
Characterization of Two Types of Intermolecular Interactions on Halogen Monoxide Monohydrates.
Journal of Computational Chemistry **30** (15), 2538-2549 (2009).
84. O. Gálvez, B. Maté, B. Martín-Llorente, V.J. Herrero and R. Escribano.
Phases of solid methanol.
Journal of Physical Chemistry A **113**, 3321 (2009).
85. O. Gálvez, B. Maté, V.J. Herrero and R. Escribano.
Spectroscopic effects in $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O}$ ices.
Astrophysical Journal **703**, 2101 (2009).

86. P. C. Gómez, O. Gálvez, and R. Escribano.
Theoretical study of atmospheric clusters: HNO₃/HCl/H₂O.
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 9710 (2009).
87. P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, C. J. Eyles, V. J. Herrero, and V. Sáez Rábanos.
Cumulative reaction probabilities and transition state properties: A study of the H⁺ + H₂ and H⁺ + D₂ proton exchange reactions.
Journal of Chemical Physics **130**, 184303 (2009).
88. C. di Lauro, G. D'Amico, M. Snels.
Torsional splittings in the diode laser slit-jet spectra of the ν_6 fundamental of 1-chloro-1,1-difluoroethane (HCFC-142b).
Journal of Molecular Spectroscopy **254**, 108-118 (2009).
89. I.M. Loroño, D. Bermejo, M. Rotger and V. Boudon.
High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the $2\nu_{10}$ Overtone Symmetric Motion of C₂H₄.
Journal of Raman Spectroscopy **40**, 1065-1071 (2009)
90. B. Martín-Llorente, D. Fernández-Torre and R. Escribano.
Theoretical study on hydrogen-bond effects in IR spectra of high- and low-temperature phases of nitric acid hydrate.
CHEMPHYSICHEM **10**, 3229 (2009).
91. B. Maté, O. Gálvez, V.J. Herrero and R. Escribano.
Infrared spectra and thermodynamic properties of CO₂/methanol ices,
Astrophysical Journal **690**, 486.(2009)
92. B. Maté, O. Gálvez, V.J. Herrero, D. Fernández-Torre, M.A. Moreno and R. Escribano.
Water-ammonium ices and the elusive 6.85 μ m band,
The Astrophysical Journal Letters **703** L178. (2009).
93. S. Montero, J.H. Morilla, G. Tejeda, and J.M. Fernández.
Experiments on small (H₂)_N clusters .
European Physical Journal D **52**, 31–34 (2009).
94. J. Ortigoso and M. Rodríguez
Molecular Optics: Controlling the dipole force
Nature Photonics **3**, 685 - 686 (2009)
95. A. Ramos, J. Santos, L. Abad, D. Bermejo, V. Herrero and I. Tanarro
Lineshape analysis of stimulated Raman spectra of the near-nozzle region of free jet expansions
Journal of Raman Spectroscopy **40**, 1249-1256 (2009)
96. A. Ramos, G. Tejeda, J. M. Fernández, and S. Montero
Non-equilibrium processes in supersonic jets of N₂, H₂, and N₂+H₂ mixtures. I. Zone of silence
Journal of Physical Chemistry A. **113**, 8506–8512 (2009)
97. L. Rubio-Lago, A. García-Vela, A. Arregui, G. Amaral, and L. Bañares.
The photodissociation of CH₃I in the red-edge of the A-band: Comparison between slice imaging experiments and multisurface wave packet calculations.
Journal of Chemical Physics **131**, 174309 (2009).
98. I. Tanarro, J. A. Ferreira, V. J. Herrero, F. L. Tabarés and C. Gómez-Aleixandre.
Removal of carbon films by oxidation in narrow gaps: Thermo-oxidation and Plasma-Assisted studies.
Journal of Nuclear Materials **390**, 696 (2009).
99. I. Tanarro, V. J. Herrero.
Ion energy distributions for the identification of active species and processes in low pressure hollow cathode discharges.
Plasma Sources Science & Technology **18**, 034007 (2009).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FNYFE / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE NUCLEAR PHYSICS AND STATISTICAL PHYSICS DEPARTMENT

J. Santos, R.A. Molina, J. Ortigoso and M. Rodríguez
Controlled localization of interacting bosons in a disordered optical lattice
Physical Review A **80**, 063602-063608 (2009).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE EVPM DEPARTMENT

100. P. Carmona, M.T. Blanco, C. Domingo and S. Martínez-Ramírez.
Effect of concentration, particle size and the presence of protective coatings in DRIFT spectra of building materials.
Vibrational Spectroscopy **50**, 312-318 (2009).
101. L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes.
Sensing Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Dithiocarbamate-Functionalized Ag Nanoparticles by Surface-Enhanced Raman Scattering.
Analytical Chemistry **81**, 953-960 (2009).
102. L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes.
Nanosensors Based on Viologen Functionalized Silver Nanoparticles: Few Molecules Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Interparticle Hot Spots.
Analytical Chemistry **81**, 1418-1425 (2009).
103. L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes.
Self-assembly of a dithiocarbamate calix[4]arene on Ag nanoparticles and its application in the fabrication of surface-enhanced Raman scattering based nanosensors.
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 1787-1793 (2009).
104. L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes.
Self-assembly of α,ω -aliphatic diamines on Ag nanoparticles as an effective localized surface plasmon nanosensor based in interparticle hot spots.
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 7363-7371 (2009).
105. P. Sevilla, F. Garcia-Blanco, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sanchez-Cortes.
Self- Aggregation of anti tumoral drug emodin on Ag nanoparticles: SEF, SERS and fluorescence lifetime experiments
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 8342-8348 (2009).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

106. J. M. Fernández, J. P. Fonfría, A. Ramos, G. Tejada, S. Montero, and F. Thibault.
Inelastic Collisions of N_2 , H_2 , and H_2+He Mixtures in Supersonic Jets by Raman Spectroscopy.
Proceedings of the 26th International Symposium on Rarified Gas Dynamics.
AIP Conference Proceedings **1084**, 571-576 (2009).
107. S. Montero.
Raman Spectroscopic Experiments on Boltzmann Collision Integral in Supersonic Jets.
Proceedings of the 26th International Symposium on Rarified Gas Dynamics.
AIP Conference Proceedings **1084**, 3-11 (2009).

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

108. A.Alonso-Herrero, T. Díaz-Santos, M. García-Marín, Luis Colina, S. Arribas and G.H. Rieke.
Massive star formation in local luminous infrared galaxies.
Astrophysics and Space Science **324** (2-4), 333-336 (2009).

109. A. Alonso-Herrero, M. García-Marín, A. Monreal-Ibero, L. Colina, S. Arribas, J. Alfonso-Garzón and A. Labiano.
PMAS optical integral field spectroscopy of Luminous Infrared Galaxies. I- The Atlas.
Astronomy & Astrophysics **506**, 1541-1562 (2009).
110. A. Alonso-Herrero, G. H. Rieke, L. Colina, M. Pereira-Santaella, M. García-Marín, J. D. Smith, B. Brandl, V. Charmandaris and L. Armus.
The extreme star formation activity of Arp299 revealed by Spitzer IRS spectral mapping.
Astrophysical Journal **697**, 660-675 (2009).
111. A.G. Bedregal, L. Colina, A. Alonso-Herrero and S. Arribas.
Near-IR integral field spectroscopy study of the star formation and AGN of the LIRG NGC 5135.
Astrophysical Journal **698**, 1852-1871 (2009).
112. M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas and A. Monreal-Ibero.
Integral field optical spectroscopy of a representative sample of ULIRGs. I. The data.
Astronomy & Astrophysics **505**, 1319-1343 (2009).
113. M. García-Marín, L. Colina and S. Arribas.
Integral field optical spectroscopy of a representative sample of ULIRGs. II. Two-dimensional kpc-scale extinction structure.
Astronomy & Astrophysics **505**, 1017-1026 (2009).
114. H. Masso and M.L. Senent
Ab Initio Characterization of C₆
The Journal of the Physical Chemistry A **113**, 12404–12410 (2009).
115. Th. Nakos, M. Baes, A. Alonso-Herrero and A. Labiano.
Studying the spectral properties of Active Galactic Nuclei in the JWST era.
New Astronomy Reviews **53**, 175–178 (2009).
116. M. Nsangou, M.L. Senent, M. Hochlaf.
Theoretical investigations of the cyanogen anion.
Chemical Physics **355**, 164–168 (2009).
117. M.A. Pérez-Torres, A. Alberdi, L. Colina, J.M. Torrelles, N. Panagia and A. Wilson.
Radio monitoring of NGC 7469: Late time radio evolution of SN 2000ft and constraints on core-collapse SN rate.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **399**, 1641-1649 (2009).
118. C. Ramos Almeida, N. Levenson, J. M. Rodríguez Espinosa, A. Alonso-Herrero, A. Asensio Ramos, J. Radomski, C. Packham, S. Fisher and C. Telesco.
The Infrared Nuclear Emission of Seyfert galaxies on pc scales: Testing the Clumpy Torus Models.
Astrophysical Journal **702**, 1127-1149 (2009).
119. G. H. Rieke, A. Alonso-Herrero, B. J. Weiner, P. G. Pérez-González, M. Blaylock, J. L. Donley and D. Marcillac.
Determining Star Formation Rates for Infrared Bright Galaxies.
Astrophysical Journal **692**, 556-573 (2009).
120. D. Rigopoulou, V. Mainieri, O. Almaini, A. Alonso-Herrero, J.-S. Huang, G. Hasinger, G. H. Rieke, J. Dunlop and I. Lehmann.
Spectral Energy Distributions of type-2 quasi-stellar objects: obscured star formation at high redshifts.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **400**, 1199-1207 (2009).
121. J. Rodríguez Zaurín, C.N. Tadhunter and R.M. González Delgado.
The properties of the stellar populations in ULIRGs I: sample, data and spectral synthesis modeling.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **400**, 1139-1180 (2009).
122. M.L. Senent, R. Ruiz, M. Villa and R. Dominguez-Gomez.
CCSD(T) study of the far-infrared spectrum of ethyl methyl ether more options.
Journal of Chemical Physics **130** (6), Article Number: 064101 (2009).

123. A. Spielfiedel, M.L. Senent, F. Dayou, C. Balanca, L. Cressiot-Vincent, A. Faure, L. Wiesenfeld and N. Feautrier.
A five-dimensional potential-energy surface for the rotational excitation of SO₂ by H-2 at low temperatures.
Journal of Chemical Physics **131** (1), Article Number: 014305 (2009).
124. O. Tengstrand, M. Guainazzi, A. Siemiginowska, N. Fonseca Bonilla, A. Labiano, D.M. Worrall, P. Grandi and E. Piconcelli.
GPS radio sources: new optical observations and an updated master list.
Astronomy and Astrophysics **501**, 89 (2009).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

125. L. Colina, S. Arribas, A. Bedregal, et al.
Integral Field Spectroscopy of (U)LIRGs. From VLT to JWST.
Science with the VLT in the ELT ERA.
Astrophysics and Space Science Proceedings, 301-305 (2009).

6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS / VIBRATIONAL SPECTROSCOPY AND MULTIPHOTON PROCESSES

126. J. Bellanato, J. L. Rodríguez-Miñón Cifuentes, E. Salvador, J. A. Medina
Urates in uric acid renal calculi
International Journal of Urology **16**, 318-322 (2009).
127. J.J. Camacho, L. Diaz, M. Santos, L.J. Juan and J.M.L. Poyato
Temporal evolution of the laser-induced plasma generated by IR CO₂ pulsed laser on carbon targets.
Journal of Applied Physics **106**, 033306-11pp (2009).
128. J. J. Camacho, M. Santos, L. Díaz and J.M.L. Poyato
Spatial characterization of the laser-induced plasma plumes generated by IR CO₂ pulsed laser on carbon targets.
Applied. Physics. A Materials Sciences & Proceedings, **94**, 373-380 (2009).
129. J. J. Camacho, M. Santos, L. Díaz, L. J. Juan and J.M.L. Poyato.
Spectroscopy study of air plasma induced by IR CO₂ laser pulses.
Applied. Physics. A Materials Sciences & Proceedings, DOI 10.1007/s00339-009-5466-x (2009).
130. P. Carmona and M. Molina.
Real time measurement of H/D exchange in a microdialysis Raman quartz cell.
Journal of Raman Spectroscopy **40**, 1301-1305 (2009).
131. P. Carmona, M. Molina and A. Rodríguez-Casado.
Raman spectra and structure of a 25mer HCV RNA.
Journal of Raman Spectroscopy **40**, 893-897 (2009).
132. P. Carmona, M. Molina and A. Rodríguez-Casado.
Improving real time measurement of H/D exchange using a FTIR biospectroscopic probe.
Analytical and Bioanalytical Chemistry **393**, 1289-1295 (2009).
133. M. Frías and S. Martínez-Ramírez.
Use of micro-Raman spectroscopy to study reaction kinetics in blended white cement pastes containing metakaolin.
Journal of Raman Spectroscopy **40**(12), 2063-2068 (2009).
134. M. Di Foggia, P. Taddei, C. Fagnano, A. Torreggiani, M. Dettin, S. Sanchez-Cortes and A. Tinti.
Vibrational characterization of self-assembling oligopeptides for tissue engineering on TiO₂ surfaces.
Journal of Molecular Structure **924-26**, 120-126 (2009).

135. V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, O. L. Muskens, and J. Gómez Rivas.
Electrodynamic calculations of spontaneous emission coupled to metal nanostructures of arbitrary shape: Nanoantenna enhanced fluorescence
Journal of the Optical Society of America B **26**, 1569-1577 (2009).
136. M. Herrero, I. Cambero, J. A. Ordóñez, L. De la Hoz and P. Carmona.
Plasma powder as cold-set binding agent for meat system: rheological and Raman spectroscopy study.
Food Chemistry **113**, 493-499 (2009).
137. M. Herrero, P. Carmona, J. A. Ordóñez, L. de la Hoz and M. I. Cambero.
Raman spectroscopic study of electron-beam irradiated cold-smoked salmon.
Food Research International **42**, 216-220 (2009).
138. M. Herrero, F. Jiménez-Colmenero and P. Carmona.
Elucidation of structural changes in soy protein isolate upon heating by Raman spectroscopy.
International Journal of Food Science and Technology **44**, 711-717 (2009).
139. M. Jadraque, M. Santos, L. Díaz, M. Martín and J. Álvarez-Ruiz.
Silicon oxide cluster formation and stability in the laser ablation of SiO targets.
Journal of Physical Chemistry A. **113** 10880-10885 (2009).
140. Z. Jurasekova, G. Marconi, S. Sanchez-Cortes and A. Torreggiani.
Spectroscopic and molecular modelling studies on the binding of the flavonoid luteolin and human serum albumin.
Biopolymers **91**, 917-927(2009).
141. Z. Jurasekova, A. Torreggiani, M. Tamba, S. Sanchez-Cortes and J. V. García-Ramos.
Raman and surface-enhanced Raman scattering (SERS) investigation of the quercetin interaction with metals: Evidence of structural changing processes in aqueous solution and on metal nanoparticles
Journal of Molecular Structure **918**, 129-137 (2009).
142. G. Lajos, D. Jancura, P. Miskovsky, J. V. García-Ramos and S. Sanchez-Cortes.
Interaction of the photosensitizer hypericin with low-density lipoproteins and phosphatidylcholine: a surface-enhanced Raman scattering and surface-fluorescence study.
Journal of Physical Chemistry C **113**, 7147-7154 (2009).
143. S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela.
Fases termodinámicamente estables en el sistema cerrado CaO-SiO₂-Al₂O₃-CaSO₄-H₂O a 25°C. Aplicación a sistemas cementantes
Materiales de Construcción **59**(294), 31-39 (2009).
144. S. Martínez-Ramírez and M. Frías.
The effect of curing temperature on white cement hydration.
Construction and Building Materials **23**(3) 1344-1348 (2009).
145. H.I. Pérez, C.I. Valencia, E.R. Méndez, and J.A. Sánchez-Gil.
On the transmission of diffuse light through thick slits
Journal of the Optical Society of America A **26**, 909-918 (2009).
146. M.L.Rodríguez-Mendez, C. Apetrei, M. Nieto, V. Hernandez, J.T.L. Navarrete, F. Effenberger and J.A. de Saja.
Sensing properties of organised films based on a bithiophene derivative.
Sensor and Actuators B-Chemical **141**(2), 625-633 (2009).
147. M.L. Rodríguez-Méndez, M. Gay, C. Apetrei, J.A. De Saja
Biogenic amines and fish freshness assessment using a multisensor system based on voltammetric electrodes. Comparison between CPE and screen-printed electrodes.
Electrochimica Acta **54**, 7033-7041 (2009).
148. Sánchez-González, A. Rodríguez-Casado, M. Careche and P. Carmona.
Raman analysis of surimi gelation by addition of wheat dietary fibre.
Food Chemistry **112**, 162-168 (2009).

149. R.D. Simoes, M.A. Rodríguez-Pérez, J.A. De Saja and C.J.L. Constantino.
Tailoring the structural properties of PVDF and P(VDF-TrFE) by using natural polymers as additives.
Polymer Engineering & Science **49**(11), 2150-2157 (2009).
150. Torreggiani, Z. Jurasekova, M. D'Angelantonio, M. Tamba, J. V. García-Ramos and S. Sanchez-Cortes.
Fabrication of Ag nanoparticles by gamma-irradiation: application to surface-enhanced Raman spectroscopy of fungicides.
Colloids and Surfaces A- Physicochemical and Engineering Aspects **339**, 60-67 (2009).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

- P. Carmona, M.T. Blanco, C. Domingo and S. Martínez-Ramírez.
Effect of concentration, particle size and the presence of protective coatings in DRIFT spectra of building materials.
Vibrational Spectroscopy **50**, 312-318 (2009).
- L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes
Sensing Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Dithiocarbamate-Functionalized Ag Nanoparticles by Surface-Enhanced Raman Scattering
Analytical Chemistry **81**, 953-960 (2009)
- L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes
Nanosensors Based on Viologen Functionalized Silver Nanoparticles: Few Molecules Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Interparticle Hot Spots
Anal. Chem. **81**, 1418-1425 (2009)
- L. Guerrini, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes
Self-assembly of a dithiocarbamate calix[4]arene on Ag nanoparticles and its application in the fabrication of surface-enhanced Raman scattering based nanosensors
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 1787-1793 (2009)
- L. Guerrini, I. Izquierdo-Lorenzo, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo and S. Sanchez-Cortes
Self-assembly of α,ω -aliphatic diamines on Ag nanoparticles as an effective localized surface plasmon nanosensor based in interparticle hot spots
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 7363-7371 (2009)
- P. Sevilla, F. Garcia-Blanco, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sanchez-Cortes.
Self- Aggregation of anti tumoral drug emodin on Ag nanoparticles: SEF, SERS and fluorescence lifetime experiments
Physical Chemistry Chemical Physics **11**, 8342-8348 (2009).

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

151. J. Carretero-Gonzalez , H. Retsos, E.P. Giannelis, T.A. Ezquerra, M. Hernandez and M.A. Lopez-Manchado.
Miscibility-dispersion, interfacial strength and nanoclay mobility relationships in polymer nanocomposites.
Soft Matter **5**(18), 3481-3486 (2009).
152. V.L. Cruz, J. Ramos, J. Martínez-Salazar, S. Gutierrez-Oliva, and A. Toro-Labbé.
Theoretical Study on a Multicenter Model Based on Different Metal Oxidation States for the Bis(imino)pyridine Iron Catalysts in Ethylene Polymerization.
Organometallics **28**(20), 5889-5895 (2009).
153. A.Flores, F. Ania and F.J. Baltá Calleja.
From the glassy state to ordered polymer structures: A microhardness study.
Polymer **50**, 729-746 (2009).
154. J. J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda and T. A. Ezquerra.
Shear Effect on Crystallizing Single Wall Carbon Nanotube/Poly(butylene terephthalate) Nanocomposites.

- Macromolecules **42**(13), 4374–4376 (2009).
155. J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, M. Kwiatkowska, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, A. Concheso, I. Guinea and T.A. Ezquerra.
Influence of preparation procedure on the conductivity and transparency of SWCNT-polymer nanocomposites.
Composites Science and Technology **69**(11-12) Special Iss, 1867-1872 (2009).
 156. R. Hernández, J. Sacristán, A. Nogales, T.A. Ezquerra and C. Mijangos.
Structural Organization of Iron Oxide Nanoparticles Synthesized Inside Hybrid Polymer Gels Derived from Alginate Studied with Small-Angle X-ray Scattering.
Langmuir **25** (22), 13212–13218, (2009).
 157. A. Linares and R. Benavente.
Effect of Sulfonation on Thermal, Mechanical, and Electrical Properties of Blends Based on Polysulfones.
Polymer Journal **41**(5), 407-415 (2009).
 158. G.-E. Logotheti, J. Ramos and I.G. Economou.
Molecular Modeling of Imidazolium-Based [Tf₂N] Ionic Liquids: Microscopic Structure, Thermodynamic and Dynamic Properties, and Segmental Dynamics.
Journal of Physical Chemistry B **113**(20), 7211-7224 (2009).
 159. J. Martín, C. Mijangos, A. Sanz, T.A. Ezquerra and A. Nogales.
Segmental Dynamics of Semicrystalline Poly(vinylidene fluoride) Nanorods.
Macromolecules **42**(14), 5395–5401 (2009).
 160. C. Navio, J. Alvarez, M.J. Capitán, J. Camarero and R. Miranda.
Thermal stability of Cu and Fe nitrides and their applications for writing locally spin valves.
Applied Physics Letters **94** (26), Article Number: 263112 (2009).
 161. M. Pieruccini and T.A. Ezquerra.
Segmental relaxation in semicrystalline polymers: A mean-field model for the distribution of relaxation times in confined regimes.
European Physical Journal E **29**(2), 163-171 (2009).
 162. I. Puente Orench, N. Stribeck, F. Ania, E. Baer, A. Hiltner and F.J. Baltá Calleja.
SAXS Study on the Crystallization of PET under Physical Confinement in PET/PC Multilayered Films.
Polymer **50**, 2680-2687 (2009).
 163. N. Robledo, J.F. Vega, J. Nieto and J. Martínez-Salazar.
The role of the interface in melt linear viscoelastic properties of LLDPE/LDPE blends: Effect of the molecular architecture of the matrix (p NA).
Journal of Applied Polymer Science **114**(1), 420-429 (2009).
 164. S.L. Souza, M.J. Capitán, J. Alvarez, S.S. Funari, M.H. Lameiro and E. Melo.
Phase Behavior of Aqueous Dispersions of Mixtures of N-Palmitoyl Ceramide and Cholesterol: A Lipid System with Ceramide-Cholesterol Crystalline Lamellar Phases.
Journal of Physical Chemistry B **113** (5), 1367-1375 (2009)
 165. J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, M. Trujillo, M. L. Arnal, A.J. Müller, S. Bredeau and Ph. Dubois.
Rheology, Processing, Tensile Properties, and Crystallization of Polyethylene/Carbon Nanotube Nanocomposites.
Macromolecules **42**(13), 4719–4727 (2009).
 166. J.F. Vega, G.W.M. Peters, and D. Hristova.
Flow induced crystallisation regimes and rheology of isotactic polypropylene: effect of molecular architecture.
Journal of Thermal Analysis Calorimetry **98**(3), 655-666 (2009).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

6.2.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH EVPM DEPARTMENT

1. M. Alvarez de Buergo, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, R. Fort, J.V. García-Ramos and M. Gomez-Heras
Monitoring the polymerization of silicon-based products for stone conservation
Coalition Newsletter 17, 2-6 (2009)

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

2. S. Arribas.
James Webb: el telescopio especial sucesor del Hubble.
Caosyciencia, <http://www.caosyciencia.com/>.
3. P. Jakobsen, S. Arribas, et al.
NIRSpec, the Near-IR Multi-object Spectrograph for JWST.
American Astronomical Society, AAS Meeting #213, #426.07; Bulletin of the American Astronomical Society, Vol. 41, p.255.

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

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

M. Alvarez de Buergo, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, R. Fort, J.V. García-Ramos and M. Gomez-Heras
Monitoring the polymerization of silicon-based products for stone conservation
Coalition Newsletter 17, 2-6 (2009)

6.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

4. J. Martínez-Salazar and J.F. Vega.
Una Mirada a la Física de Polímeros en España.
Revista Española de Física, Vol. Octubre-Diciembre, 53-57 (2009).

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

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

1. A.N. Antonov, M.V. Ivanov, M.K. Gaidarov, J.A. Caballero, M.B. Barbaro and E. Moya de Guerra.
Superscaling analyses, lepton scattering and nucleon momentum distributions in nuclei.
Proceedings of the 12th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms, V.1, p.87-94
ISBN: 978-92-9083-340-6
2. J. Barea.
Calculation of neutrinoless double beta decay matrix elements in the Interacting Boson Model
Workshop on Calculation of Double-Beta-Decay Matrix Elements (Medex '09)

- AIP Conference Proceedings 1180 (2009) 16-20.
ISBN: 978-0-7354-0721-3.
3. R. Becker, I. Bustinduy.
H- Ion source and LEBT design with nIGUN.
ESS-Bilbao Initiative Workshop (Multi MW Spallation Neutron Sources: Current Challenges and Future Prospects) Bilbao, Spain 4-8th of March 2009.
 4. F. J. Bermejo, J. Lucas, I. Bustinduy.
Baseline Design for the ESS-Bilbao Superconducting Proton Accelerator.
Particle Accelerator Conference —PAC09 Vancouver, Canada 4-8th of May 2009.
 5. F. J. Bermejo, I. Bustinduy, J. Lucas.
The ESS-Bilbao Machine Concept.
ESS-Bilbao Initiative Workshop (Multi MW Spallation Neutron Sources: Current Challenges and Future Prospects) Bilbao, Spain 4-8th of March 2009.
 6. M.J.G. Borge, M. Cubero, L. Acosta, Martín Alcorta, M. Alvarez, Ch. Aa. Diget, J.P. Fernandez, J.A. Lay, J. Gómez-Camacho, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, A. M. Sánchez-Benítez, O. Tengblad and P. Walden.
Halo effects in the Scattering of ^{11}Li on heavy targets at energies around the Coulomb barrier.
Congreso “Radioactive Nuclear Beams 8”, CD.
 7. I. Bustinduy, F. J. Bermejo, L. Uriarte, J. Lucas.
A Superconducting Proton Linac for the ESS-Bilbao Accelerator.
42nd ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on High-Intensity, High-Brightness Hadron Beams — HB2008— Nashville, TN, USA 4-8th of August 2008.
 8. I. Bustinduy, J. Lucas, F.J. Bermejo.
Multiparticle Beam Dynamics Simulations for the ESS-Bilbao Superconducting Proton Accelerator.
Proceedings of 14th International Conference on RF Superconductivity —SRF2009- pp.869-870.
 9. I. Bustinduy, J. Lucas, F. J. Bermejo, D. Jeon.
Accelerating Spoke Cavities for the ESS-Bilbao linac.
ESS-Bilbao Initiative Workshop (Multi MW Spallation Neutron Sources: Current Challenges and Future Prospects) Bilbao, Spain 4-8th of March 2009.
 10. E. Moya de Guerra, R. Alvarez-Rodriguez, O. Moreno, P. Sarriguren.
Single State Dominance and other issues relevant to DBDME.
Proceedings of the Int. Conference on Calculation of double-beta decay matrix.
AIP Conference Proceedings 1180 (2009) 71-75.
ISBN: 978-0-7354-0721-3.
 11. E. Moya de Guerra, O. Moreno, P. Sarriguren, R. Alvarez-Rodriguez.
Double beta decay and the single state dominance hypothesis.
“Mathematical Physics and Field Theory”, 299-308 (Prensas Universitarias de Zaragoza, 2009)
ISBN: 978-84-92774-04-3.
 12. L. Muñoz, R. A. Molina, J. Retamosa, A. Relaño, E. Faleiro.
Caos cuántico y ruido 1/f: aplicación al estudio de niveles perdidos y simetrías mezcladas en espectros nucleares.
Actas de la XXXII Biental de la Real Sociedad Española de Física y 19^o Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física.
ISBN: 978-84-692-4956-7
 13. Olof Tengblad.
NUSTAR and the status of the R3B project at FAIR.
Proceedings of the “ISNP 2009 International Nuclear Physics Symposium”.

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

14. D. Fernández Torre.
Optical Properties of the Atmosphere.

- In "Spectroscopy of the Atmospheres" 2009.
Editor: R. Escribano (capítulo 5, pags. 55-61).
15. O. Gálvez
Application of models to tropospheric analysis.
In "Spectroscopy of the Atmospheres" 2009.
Editor: R. Escribano (capítulo 26, pags. 299--312)
16. V. J. Herrero
Introduction to the atmosphere (capítulo 1, pags 1—15).
Photochemistry in the atmosphere (capítulo 6, pags 63--77).
In "Spectroscopy of the Atmospheres" 2009.
Editor: R. Escribano
17. B. Maté
Physical processes in the atmosphere.
In "Spectroscopy of the Atmospheres" 2009.
Editor: R. Escribano (capítulo 4, pags 47--54).
18. I. Tanarro.
Spectroscopic Techniques"
In "Spectroscopy of the Atmospheres" 2009
Editor: R. Escribano (capítulo 8, pags 87-103)

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

19. P. G. Pérez-González, A. Alonso-Herrero, G. Barro, G. H. Rieke, J. Donley, J. Gallego and J. Zamorao.
Quantifying downsizing & its origin: the mass assembly of galaxies and the role of AGN.
"The Starburst-AGN Connection".
ASP Conference Series, Vol. 408, p 384 (2009).
20. L. Videla, P. Lira, A. Alonso-Herrero, D. Alexander, and M. J. Ward.
On the infrared properties of dusty torus.
"XII Latin American IAU Regional Meeting".
Revista Mexicana de Astronomía y Astrofísica Serie de Conferencias, Vol. 35, p 294 (2009).

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

21. J. J. Camacho, L. Díaz, M. Santos, L. J. Juan and J.M.L. Poyato.
Optical Breakdown in gases induced by high-power IR CO₂ laser pulses
Laser Beams: Theory, Properties and Applications. Nova Science Publishers, Inc.(2009. Chapter 13, 86pp).
ISBN: 978-1-60876-266-8.
22. J. J. Camacho, J. M. L. Poyato, L. Díaz and M. Santos .
Spectroscopic analysis of chemical species in carbon plasmas induced by high-power ir co₂ laser
Applied Physics in the 21st Century (Horizons in World Physics, Volume 266) R. P. Valencia. Nova Science Publishers, Inc. (2009. Chapter 2, 50pp). ISBN: 978-1-60876-074-9.
23. P. Carmona, M. Molina, A. Rodríguez-Casado.
Insights into Vibrational Spectroscopy of Nucleic Acids and their Complexes.
"On the Nucleic Acid Structures in Triplexes and Protein Complexes as Revealed by Raman and Infrared Spectroscopy", 87-100 (Transworld Research Network, Kerala, 2009).
ISBN: 978-81-7895-407-3.

6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

24. T.A. Ezquerro, M.C. Garcia-Gutierrez, A. Nogales, and M. Gomez (Eds.).
“Applications of Synchrotron Light to Scattering and Diffraction in Materials and Life Sciences”
Series: [Lecture Notes in Physics](#) , Vol. 776, 2009, XVI, 318 p. 177 illus., 20 in color., Hardcover
ISBN: 978-3-540-95967-0.
25. M.C. García-Gutiérrez and D.R. Rueda.
Bases of Synchrotron Radiation, Light Sources, and Features of X-Ray Scattering Beamlines
“Applications of Synchrotron Light to Scattering and Diffraction in Materials and Life Sciences”
Chapter 1, pages 1-22 (2009).
Book Series [Lecture Notes in Physics](#) Publisher Springer Berlin / Heidelberg ISSN 1616-6361 Volume
776/2009. DOI 10.1007/978-3-540-95968-7 Copyright 2009 ISBN 978-3-540-95967-0 DOI 10.1007/978-3-540-95968-7_1.

6.4 TESIS DOCTORALES / Ph. D. THESES

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

Title: **Classical and Quantum Formulations of S1XS2 and S3 Gowdy Models Coupled With Matter.**

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

Date: 18 May 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Daniel Gómez Vergel.**

Supervisor: **Jesús Fernando Barbero González and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.**

Title: **High-Order Perturbation Theory of Spherical Spacetimes with Application to Vacuum and Perfect Fluid Matter.**

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 15 April 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **David Brizuela Cieza.**

Supervisor: **Guillermo Antonio Mena Marugán and José María Martín García.**

Title: **Emergent Gravity: the BEC Paradigm.**

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

Date: 9 July 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Gil Jannes.**

Supervisor: **Luis Javier Garay Elizondo and Carlos Barceló Serón.**

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

Title: **Modelos de Richardson-Gaudin de rango mayor que uno.**

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 23th of September 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Beatriz Errea Subero.**

Supervisor: **Jorge Dukelsky.**

Title: **Estudio de reacciones de ^6He en Pb a energías próximas a la barrera coulombiana.**

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 28th of September 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: **Diego Escrig Forano.**

Supervisor: **M^a José García Borge.**

Title: S Study of the Multi-fragmentation channels following the β -decay of the halo nucleus ^{11}Li and its core ^9Li .

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 18th of December 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Miguel Madurga Flores.

Supervisor: M^a José García Borge.

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: Astofísica Molecular: Caracterización de Envolturas Circunestelares y Procesos Colisionales en el Laboratorio.

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

Date: 3rd of February 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: José Pablo Fonfría Expósito.

Supervisor: Salvador Montero Martín and José Cernicharo Quintanilla.

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

Title: A mid-infrared study of local luminous infrared galaxies.

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

Date: 27th of February 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Tanio Díaz Santos.

Supervisor: Almudena Alonso Herrero and Luis Colina Robledo.

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

Title: Funcionalización de Nanopartículas metálicas para la detección de contaminantes mediante espectroscopía SERS

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 5 de marzo 2009

Mark: Sobresaliente “cum laude” (**Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid**)

Candidate: Luca Guerrini

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés y José Vicente García Ramos.

Title: Espectroscopías ópticas sobre superficies metálicas nanoestructuradas aplicadas al estudio de flavonoides: Pigmentos amarillos de interés en el Patrimonio Histórico Cultural

University: Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Educación a Distancia.

Date: 29 de Septiembre 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: Zuzana Jurasekova.

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés y José Vicente García Ramos.

6.4.6. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Estructura y Propiedades de Poliolefinas Obtenidas Mediante Síntesis Dual.

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

Date: 18th of December 2009.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Jon Otegui de la Fuente.

Supervisor: Juan Francisco Vega Borrego and Víctor Cruz Cañas.

6.5 TESIS DE LICENCIATURA, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER

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

Title: **Cosmología Cuántica de Lazos.**

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

Date: 28 September 2009.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Javier Antonio Olmedo Nieto.**

Supervisor: **Guillermo Antonio Mena Marugán.**

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

Title: **Descripción del experimento E1104 y las técnicas de análisis desarrolladas para estudiar la dispersión e ^{11}Li en ^{208}Pb a energías próximas a la barrera coulombiana.**

University: Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 18th of December 2009.

Mark: Aprobado.

Candidate: **Mario Cubero Campos.**

Supervisor: **María José García Borge**

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

Title: **Detección de Drogas dopantes deportivas mediante sensores químicos basados en espectroscopía Raman intensificada por superficies (SERS)**

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.

Date: Julio 2009

Mark: Sobresaliente

Candidate: **Irene Izquierdo**

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés.**

Title: **Caracterización de pigmentos sintéticos mediante Espectroscopia Raman Intensificada por Superficie (SERS): Quinacridona quinona y N,N-Dimetilquinacridona**

University: Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid.

Date: Julio 2009.

Mark: Sobresaliente

Candidate: **Elena del Puerto.**

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés.**

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 | Expected 2009 | 2009 |
|--|------------------|------|------------------|------|------------------|------|------------------|------|------------------|------|
| Number of ISI publications | 135 | 140 | 140 | 178 | 147 | 181 | 155 | 171 | 165 | 166 |
| Number of non-ISI publications | 13 | 18 | 13 | 20 | 13 | 31 | 14 | 46 | 14 | 29 |
| Total stock of PhD fellowships and contracts | 23 | 32 | 24 | 39 | 25 | 40 | 25 | 41 | 26 | 34 |
| Stock of postdoc fellowships and contracts | 13 | 15 | 14 | 18 | 15 | 15 | 16 | 22 | 18 | 18 |
| Number of PhD Theses defended | 4 | 4 | 5 | 8 | 5 | 10 | 6 | 5 | 7 | 11 |
| “Créditos” in PhD and Master Courses | 20 | 20 | 22 | 27,5 | 25 | 49,2 | 28 | 46 | 30 | 43,6 |

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

| JOURNAL | NUMBER OF PAPERS | IMPACT FACTOR (JCR -2008) |
|---|------------------|---------------------------|
| Nature Photonics | 1 | 24.982 |
| Physical Review Letters | 4 | 7.180 |
| Journal of Cosmology and Astroparticle Physics | 1 | 6.389 |
| Astrophysical Journal | 6 | 6.331 |
| Analytical Chemistry | 2 | 5.712 |
| Journal of Physics G – Nuclear and Particle Physics | 4 | 5.270 |
| Monthly Notices of the Royal Astronomical Society | 3 | 5.185 |
| Physical Review D | 10 | 5.050 |
| Soft Matter | 1 | 4.586 |
| Macromolecules | 3 | 4.407 |
| Journal of Physical Chemistry B | 2 | 4.189 |
| Astronomy & Astrophysics | 4 | 4.153 |
| Langmuir | 1 | 4.097 |
| Physical Chemistry Chemical Physics | 4 | 4.064 |
| Physics Letters B | 7 | 4.034 |
| Organometallics | 1 | 3.815 |
| Applied Physics Letters | 1 | 3.726 |
| CHEMPHYSICHEM | 1 | 3.636 |
| Journal of Raman Spectroscopy | 5 | 3.526 |
| New Journal of Physics | 1 | 3.440 |
| Journal of Physical Chemistry C | 1 | 3.396 |
| Journal of Computational Chemistry | 1 | 3.390 |
| Polymer | 2 | 3.331 |
| Analytical and Bioanalytical Chemistry | 1 | 3.328 |
| Physical Review B | 2 | 3.322 |
| Annals of Physics | 1 | 3.171 |
| Journal of Chemical Physics | 5 | 3.149 |
| Physical Review C | 15 | 3.124 |
| Sensor and Actuators B-Chemical | 1 | 3.122 |
| Electrochimica Acta | 1 | 3.078 |

| | | |
|--|------------|---------------------------------------|
| Classical and Quantum Gravity | 4 | 3.035 |
| Physical Review A | 4 | 2.908 |
| Journal of Physical Chemistry A | 4 | 2.871 |
| Biopolymers | 1 | 2.823 |
| Physics in Medicine and Biology | 1 | 2.784 |
| Food Chemistry | 2 | 2.696 |
| Plasma Sources Science and Technology | 1 | 2.685 |
| Composites Science and Technology | 1 | 2.533 |
| Journal of Applied Physics | 1 | 2.201 |
| Journal of the Optical Society of America B | 1 | 2.181 |
| Food Research International | 1 | 2.073 |
| European Physical Journal A | 2 | 2.015 |
| International Journal of Modern Physics D | 1 | 1.968 |
| Chemical Physics | 1 | 1.961 |
| Nuclear Physics A | 1 | 1.959 |
| European Physical Journal E | 1 | 1.943 |
| Colloids and Surfaces A Physicochemical and Eng. Aspects | 1 | 1.926 |
| Applied Physics A Materials Sciences and Proceedings. | 2 | 1.884 |
| Journal of the Optical Society of America A | 1 | 1.870 |
| Vibrational Spectroscopy | 1 | 1.810 |
| General Relativity and Gravitation | 2 | 1.803 |
| Journal of Molecular Structure | 2 | 1.694 |
| Journal of Molecular Spectroscopy | 1 | 1.636 |
| Journal of Thermal Analysis Calorimetry | 1 | 1.630 |
| Journal of Nuclear Materials | 1 | 1.501 |
| Polymer Journal | 1 | 1.456 |
| European Physical Journal D | 1 | 1.397 |
| Astrophysics and Space Science | 1 | 1.283 |
| Polymer Engineering and Science | 1 | 1.245 |
| Journal of Applied Polymer Science | 1 | 1.187 |
| International Journal of Food Science and Technology | 1 | 1.065 |
| Nuclear Instruments and Methods A | 2 | 1.019 |
| Few-body Systems | 3 | 1.014 |
| New Astronomy Reviews | 1 | 1.000 |
| International Journal of Modern Physics A | 1 | 0.982 |
| International Journal of Urology | 1 | 0.982 |
| Construction and Building Materials | 1 | 0.947 |
| Low Temperature Physics | 1 | 0.780 |
| Acta Physica Polonica B | 2 | 0.767 |
| Materiales de Construcción | 1 | 0.603 |
| International Journal of Modern Physics E | 1 | 0.492 |
| Astrophysical Journal Letters | 1 | - |
| TOTAL: | 152 | Average Impact Factor: 3.46 |

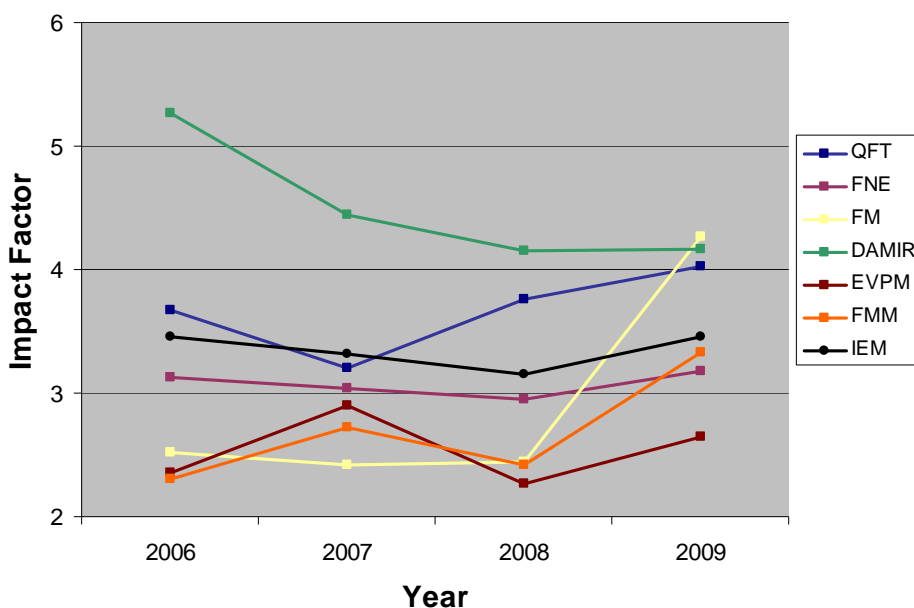
Number of Journals: 72

ISI-PROCEEDINGS: 14

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

Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry: QFT
 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 | - | - | 5 | 1 | 1 | 1 | 7 | 3 | 2 | 1 | 22 | 8 | 30 |
| FM | 10 | 3 | - | 1 | 3 | - | - | - | 1 | 3 | 3 | 1 | 17 | 8 | 25 |
| DAMIR | 2 | 2 | - | - | 5 | 1 | - | 1 | 3 | 1 | - | - | 10 | 5 | 15 |
| EVPM | 4 | 2 | - | - | - | 1 | - | 3 | 2 | 4 | 1 | 2 | 7 | 12 | 19 |
| FMM | 6 | 6 | - | - | 2 | - | 1 | 1 | 3 | 2 | 2 | 1 | 14 | 10 | 24 |
| Admon. | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 8 | - | 8 | 8 |
| IEM | 32 | 15 | - | 1 | 18 | 3 | 4 | 6 | 20 | 14 | 8 | 13 | 82 | 52 | 134 |

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: 124**

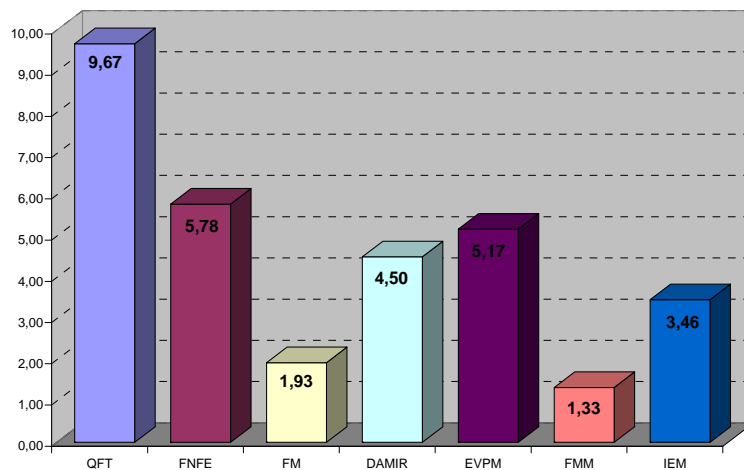
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

| | QFT | FNFE | FM | DAMIR | EVPM | FMM |
|--------------------|-----|---------|---------|-------|---------|-----|
| ISI publications | 29 | 51(+1)* | 20(+7)* | 18 | 25(+6)* | 16 |
| Other publications | 0 | 13 | 5(+1)* | 4 | 3(+1)* | 3 |

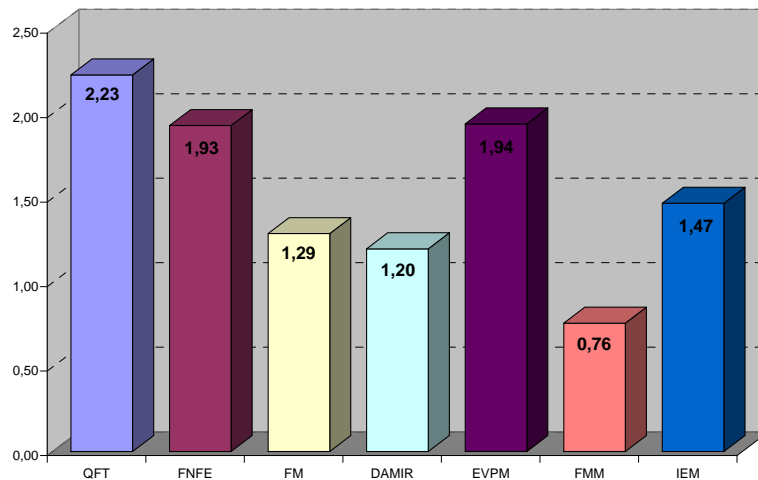
* In parenthesis, papers shared between the FNFE, FM and EVPM Departments.

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: 3.53.

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 | 9 |
| Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC | 10 |
| 2A. Labor Investigadora | 11 |
| 2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas..... | 13 |
| 2A.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística..... | 18 |
| 2A.3 Dpto. de Física Molecular..... | 26 |
| 2A.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja..... | 32 |
| 2A.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos..... | 35 |
| 2A.6 Dpto. de Física Macromolecular..... | 40 |
| 2B. Research Activities..... | 49 |
| 2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept. | 51 |
| 2B.2 Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. | 55 |
| 2B.3 Molecular Physics Dept. | 63 |
| 2B.4 Molecular and Infrared Astrophysics Dept. | 68 |
| 2B.5 Vibrational Spectroscopy and Multiphoton Processes Dept..... | 71 |
| 2B.6 Macromolecular Physics Dept. | 76 |
| 3. Proyectos de Investigación / Research Grants | 83 |
| 3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas..... | 85 |
| 3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística..... | 85 |
| 3.3 Dpto. de Física Molecular..... | 88 |
| 3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja..... | 90 |
| 3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos..... | 91 |
| 3.6 Dpto. de Física Macromolecular..... | 92 |
| 4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation..... | 95 |
| 4.1 Congresos y Reuniones Nacionales / National Congresses and Meetings..... | 97 |
| 4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas..... | 97 |
| 4.1.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 97 |
| 4.1.3 Dpto. de Física Molecular | 97 |
| 4.1.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 98 |
| 4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular | 98 |
| 4.2 Congresos y Reuniones Internacionales / International Congresses and Meetings..... | 99 |
| 4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas..... | 99 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 4.2.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 100 |
| 4.2.3 | Dpto. de Física Molecular | 102 |
| 4.2.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 103 |
| 4.2.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 106 |
| 4.2.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 107 |
| 4.3 | Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors | 109 |
| 4.3.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 109 |
| 4.3.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 109 |
| 4.3.3 | Dpto. de Física Molecular | 110 |
| 4.3.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 110 |
| 4.3.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 111 |
| 4.3.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 111 |
| 4.4 | Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Conferences..... | 111 |
| 4.4.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 111 |
| 4.4.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 113 |
| 4.4.3 | Dpto. de Física Molecular | 113 |
| 4.4.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 113 |
| 4.4.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 114 |
| 4.4.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 114 |
| 4.5 | Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions . | 115 |
| 4.5.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 115 |
| 4.5.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 116 |
| 4.5.3 | Dpto. de Física Molecular | 117 |
| 4.5.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 117 |
| 4.5.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 117 |
| 4.5.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 118 |
| 5. | Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities | 119 |
| 5.1 | Asignaturas de Doctorado / PhD and Master Courses | 121 |
| 5.1.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 121 |
| 5.1.3 | Dpto. de Física Molecular | 121 |
| 5.1.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 121 |
| 5.1.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 122 |
| 5.2 | Cursos y Conferencias / Courses and Conferences | 122 |
| 5.2.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 122 |
| 5.2.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 123 |
| 5.2.3 | Dpto. de Física Molecular | 123 |
| 5.2.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 124 |
| 5.2.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 125 |
| 5.2.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 125 |
| 5.3 | Cursos, Congresos y Seminarios Organizados por el Instituto / Courses, Congresses, and Seminars Organized by the Institute..... | 125 |
| 5.3.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 125 |
| 5.3.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 126 |
| 5.3.3 | Dpto. de Física Molecular | 126 |
| 5.3.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 127 |
| 5.3.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 127 |
| 5.3.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 127 |
| 5.4 | Premios y Otros Méritos /Awards | 128 |
| 5.4.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 128 |
| 5.4.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 129 |
| 5.4.3 | Dpto. de Física Molecular | 129 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 5.4.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 130 |
| 5.4.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 130 |
| 5.4.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 131 |
| 5.5 | Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology..... | 131 |
| 5.5.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 131 |
| 5.6 | Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities.... | 132 |
| 5.6.1. | Dpto. de Química y Física Teóricas | 132 |
| 5.6.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 132 |
| 5.6.3 | Dpto. de Física Molecular | 133 |
| 5.6.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 133 |
| 5.6.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 133 |
| 6. | Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production | 135 |
| 6.1 | Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications | 137 |
| 6.1.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 137 |
| 6.1.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 139 |
| 6.1.3 | Dpto. de Física Molecular | 143 |
| 6.1.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 145 |
| 6.1.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 147 |
| 6.1.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 149 |
| 6.2 | Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications..... | 151 |
| 6.2.3 | Dpto. de Física Molecular | 151 |
| 6.2.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 151 |
| 6.2.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 151 |
| 6.2.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 151 |
| 6.3 | Libros, Monografías y Publicaciones de <i>Proceedings</i> / Books, Proceedings, and Other Publications | 151 |
| 6.3.2 | Dpto. Física Nuclear y Física Estadística | 151 |
| 6.3.3 | Dpto. de Física Molecular | 152 |
| 6.3.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 153 |
| 6.3.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 153 |
| 6.3.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 154 |
| 6.4 | Tesis Doctorales / PhD Theses | 154 |
| 6.4.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 154 |
| 6.4.2 | Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística | 154 |
| 6.4.3 | Dpto. de Física Molecular | 155 |
| 6.4.4 | Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja | 155 |
| 6.4.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 155 |
| 6.4.6 | Dpto. de Física Macromolecular | 155 |
| 6.5 | Tesinas, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster / Graduate Diplomas and Master Theses | 156 |
| 6.5.1 | Dpto. de Química y Física Teóricas | 156 |
| 6.5.2 | Física Nuclear y Física Estadística | 156 |
| 6.5.5 | Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos | 156 |
| 7. | Tablas y Datos / Tables and Data | 159 |
| 7.1 | Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan..... | 161 |
| 7.2 | Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals..... | 161 |
| 7.3 | Evolución del índice de impacto por Departamentos / Evolution of the impact factor by Departments | 163 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 7.4 | Personal por Departamentos / Personnel by Departments..... | 163 |
| 7.5 | Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments..... | 164 |
| 7.6 | Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments..... | 164 |