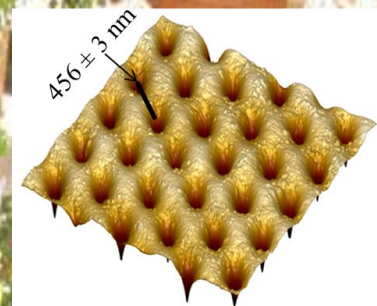
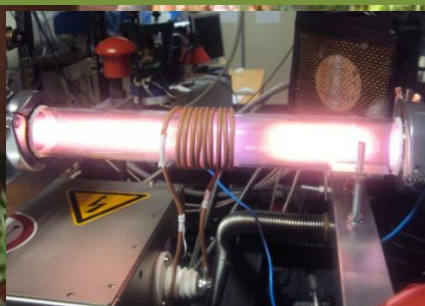
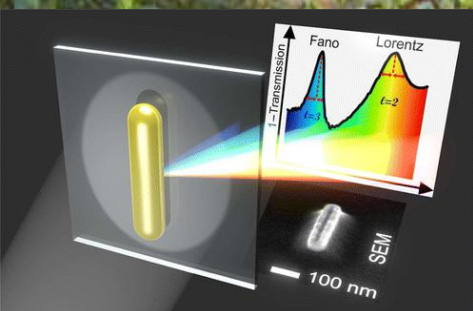
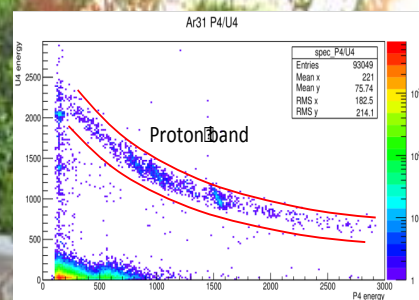


INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA



MEMORIA DE LA LABOR REALIZADA AÑO 2014



CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS

ANNUAL REPORT 2014



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE ECONOMÍA
Y COMPETITIVIDAD



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) es un 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 en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2014, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la 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 en otras áreas relacionadas.

En 1976, los científicos en plantilla del Instituto eran sólo cinco. En la actualidad, acoge a unos cuarenta y cinco investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

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

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

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

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2014 en 187 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a 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 included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2014, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, 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 other related fields.

In 1976, scientists at the Institute staff were only five. Currently, IEM hosts around forty five permanent researchers distributed in the following Departments:

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

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

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

This scientific activity, during 2014, has crystallized in 187 ISI publications.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / *DIRECTION*

Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Vicedirector: Dr. José M. Fernández Sánchez

Gerente / Manager: D^a. Pilar Criado Escribano (until 1st June 2014)

Gerente / Manager: D^a. Yolanda Pechero Redondo (since 2nd June 2014)

JUNTA DE INSTITUTO / *INSTITUTE BOARD*

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria: D^a. Pilar Criado Escribano (until 1st June 2014)

Secretaria: D^a. Yolanda Pechero Redondo (since 2nd June 2014)

Vocales:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof. José González Carmona

Dr. Rafael Molina Fernández

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / *SCIENTIFIC STAFF*

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretario: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador en plantilla:

Dr. Fernando Ania García

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dr. Gianluca Calcagni

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Víctor 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

Dr. Óscar Gálvez González

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Prof. José Vicente García Ramos

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez
 Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Dra. Belén Maté Naya
 Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dr. Rafael Molina Fernández
 Dra. Aurora Nogales Ruiz
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
 Dr. Santiago Sánchez Cortés
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Prof. Pedro Sarriguren Suquibide
 Dra. M^a Luisa Senent Díez
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. Vicente Timón Salinero
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Prof. 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. Pedro Jorge Dukelsky Bercovich
 Dr. Pedro Sarriguren Suquibide
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
 Dra. María Luisa Senent Díez
 Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández
 Dr. Gianluca Calcagni
 Dr. Jordi Mur Petit
 Dra. Rosa Domínguez Gómez
 Dr. Carlos Esebbag Benchimol
 Dr. Luis Javier Garay Elizondo
 Dra. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)
 D. Juan Manuel Boillos Betete

Profesor de Investigación / Research Professor
 Profesor de Investigación / Research Professor
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigador Científico / Research Scientist
 Investigadora Científica / Research Scientist
 Científico Titular / Tenured Scientist
 Investigador Contratado RyC / Tenure Track Contract R&C
 Investigador Contratado JAE Doc / Postdoc contract JAE Doc
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
 Doctora Vinculada / Adjoint Researcher
 Titulado Superior asociado a proyecto / University Graduate
 (Project Grant)

D. Mikel Fernández Méndez

Contrato Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE
(until 30-09- 2014)

D. Daniel Huerga Gómez

Contrato Predoctoral FPI / PhD Fellowship FPI
(until 30-09-2014)

D. Enrique Benito Matías

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Rahma Boussessi

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Laura Castelló Gomar

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Samira Dalbouha

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Beatriz Elizaga de Navascués

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Sandra Giuliani

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D. Juan Margalef Bentabol

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Diana Navas Nicolás

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dña. Laura Ortiz y Martín

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

D. Alejandro David Somoza Márquez

(until 30-09- 2014)

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay***DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS**
/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY**Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / *Research Scientist***Personal Científico / Research Staff:**

Prof. Javier Bermejo Barrera
 Prof. José V. García Ramos
 Prof. Olof Erik Tengblad
 Dr. Carlos Cabrillo García
 Dr. Pedro Carmona Hernández
 Dra. Andrea Jungclaus
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dra. M^a Vega Cañamares Arribas
 Dr. Luis Díaz Sol
 Dr. Ricardo Fernández Perea
 Dra. Sagrario Martínez Ramírez
 Dra. Marina Molina Santos
 Dra. Paz Sevilla Sierra
 D. Mariano Carmona Gallardo
 D. Alejandro Garzón Camacho
 D. Eduardo López Tobar
 Dr. Ramón Paniagua Domínguez
 D. Vicente Pesudo Fortes
 D. Diego Romero Abujetas
 Dr. José Sánchez del Río Sáez
 D. Jan Taprogge
 Dña. Adiane García Leis
 Dña. Irene Marroquín Alonso
 D. Guillermo Ribeiro Jiménez
 Dña. Elisa Corda
 Dña. Rocío Gutierrez Contreras
 D. Andrés Illana Sisón
 Dña. Jana Kubacková
 D. Moisés Martín Garrido

Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Investigador Científico / *Research Scientist*
 Investigador Científico / *Research Scientist*
 Investigadora Científica / *Research Scientist*
 Investigador Científico / *Research Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*
 Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Titulado Superior Contratado / *University Graduate*
 Contrato Predoctoral-JAE / *PhD Fellowship-JAE*
 Contrato Predoctoral-FPI/ *PhD Fellowship-FPI*
 Contrato Predoctoral-FPI / *PhD Fellowship-FPI*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. Enrique Nácher González
 D. Ángel Perea Martínez
 Dña. Purificación Corchete Corchete

Titulado Superior Especializado / *Specialized Researcher*
 Ingeniero Electrónico / *Electronic Engineer*
 Ayudante de Investigación OPI/ *Research Assistant*

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

Dr. Juan Ortigoso Martínez

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

Prof. Dionisio Bermejo Plaza
 Prof^a. Concepción Domingo Maroto

 Prof. Rafael Escribano Torres
 Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga
 Prof. Salvador Montero Martín

 Dr. José Luis Domenech Martínez

Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesora de Investigación / *Research Professor* (retired on April 22)
 Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesor de Investigación “ad honorem” / *Research Professor “ad honorem”*
 Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José María Fernández Sánchez
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Dra. Belén Maté Naya
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Dr. Vicente Timón Salinero
 Dr. Óscar Gálvez González
 Dra. Elena Moreno Atahonero
 Dña Teresa Cueto Senra
 D. Miguel Jiménez Redondo
 D. Francisco Colmenero Ruiz

Investigador Científico / *Research Scientist*
 Investigadora Científica / *Research Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científica Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Postdoctoral RyC / *Tenure Track Contract R&C*
 Postdoctoral Consolidar / *Postdoc Contract Consolidar*
 Titulado superior contratado / *MSc contract*
 Contratado predoctoral FPI / *Ph D fellow-FPI*
 Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPI*

D. Ángel González Valdenebro

Ayudante de Investigación OPI / *Research Assistant OPI* (since 06-10-2014)

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz
 Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana
 Dra. Aurora Nogales Ruíz
 Dr. Daniel R. Rueda Bravo
 Dr. Fernando Ania García
 Dra. María José Capitán Aranda
 Dr. Victor Cruz Cañas
 Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat
 Dra. M^a Cruz García Gutiérrez
 Dra. Amelia Linares Dos Santos
 Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Profesor de Investigación / *Research Professor*
 Investigador Científico / *Research Scientist*
 Investigador Científico / *Research Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Científico Titular / *Tenured Scientist*
 Profesor de Investigación “ad honorem” / *Research Professor “ad honorem”*

Dra. Carmen Arribas Arribas
 Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 Dra. Michela Soccio

Doctor Vinculado / *Adjoint Researcher*
 Investigador Contratado RyC / *Tenure Track Contract R&C*.
 Investigadora Contratada JAE DOC / *Postdoc JAE*
 (until 31-01-2014)

Dña. Jing Cui
 D. Juan Felipe Franco González

Becaria Predoctoral / *PhD Fellowship*
 Becario Predoctoral-FPI / *PhD Fellowship-FPI*
 (until 01-11-2014)

D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato
 D. Álvaro Rodríguez Rodríguez
 D. Daniel Martínez Tong
 D. Fernando Caballero Pedrero

Becario Predoctoral / *PhD Fellowship* (until 31-07-2014)
 Contratado predoctoral FPI / *PhD Fellowship-FPI*
 Becario Predoctoral JAE / *PhD Fellowship-JAE*
 Becario JAE Introducción / *PhD Fellowship Introduction*
 (01-10-2014/31-12-2014)

D. Joel Fernández Alcázar

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 (since 15-10-2014)

Doña Laura Genovese

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 (since 29-09-2014)

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 (since 03-02-2014 until 15-05-2014 / Contrato Post-doc / *Post-doc Contract* (since 16-05-2014 until 15-06-2014)

D. Adrián Sánchez Fernández

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 (since 23-06-2014)

Dr. Alejandro Sanz Parras

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*
 (until 12-09-2014)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

D. Rafael Núñez Ramírez

Dña. María José Malagón Sisto

Titulado Superior Especializado / *Specialized University Graduate*Titulado Superior Especializado / *Specialized University Graduate* (until 23-07-2014)Ayudante de Investigación / *Research Assistant***UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA /
FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE OFFICE**

Dña. Pilar Criado Escribano

Dña. Yolanda Pechero Redondo

Dña. Concepción Nieto Serrano

Dña. Purificación Díez Rodríguez

Dña. Alicia Fernández Clavero

Dña. Ana María García Arribas

Dña. Carmen García Collado

Dña. Beatriz Gil Sánchez

Dña. Susana Esteban Serrano

Dña. Isabel Lombán Botello

Gerente (until 1st June 2014)Gerente (since 2nd June 2014)

Cuerpo Técnico de Informática de la Admon. del Estado

Cuerpo General Admvo. de la Admon. del Estado

Ayudante de Investigación de OPIS (CFMAC)

Ayudante de Investigación de OPIS

Ayudante de Investigación de OPIS

Cuerpo General Admvo. de la Admon. del Estado

Cuerpo Auxiliares Postales y de Telégrafos

Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo

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

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García

D. José Manuel Segura González

Cuerpo General Administrativo de la Admon. del Estado

Cuerpo Auxiliares de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA / LIBRARY

Dña. Flora Granizo Barrena

Dña. Beatriz Fernández Suzor

Dña. Isabel Delgado Oliva

D. Samuel López Márquez

Técnico Superior Especializado de OPIS

Técnico Especializado de OPIS

Técnico Especializado de OPIS

Administrativo de OPIS

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbás Utrilla

Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes

Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA / COMPUTER SERVICES

D. Francisco Daniel Rincón Fuentes

Técnico Especializado de OPIS

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

Dña. Belén Palero Fernández

D. Fernando Pueyo García

D. Enrique Sánchez Gutiérrez

Ayudante de Investigación OPI (until 30th September 2014)

Técnico Especialista Grado Medio OPI

Contratado Oficial de Actividades Téc. y Profesionales
(until 30th April 2014)**TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP**

D. Luis Ángel de Prado Serrano

Ayudante de Investigación

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco

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

CAPÍTULO 2A

LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Teoría de la Materia Condensada
- Física Atómica y Molecular a muy baja temperatura.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica y al estudio de Nuevos Materiales

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos computacionales en Física Gravitacional.
- Análogos de agujeros negros en Materia Condensada.
- Combinatoria.
- Teoría cuántica de campos.
- Modelos de gravedad cuántica y geometría fractal.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Modelos exactamente solubles.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Átomos y moléculas en degeneración cuántica o en redes ópticas.
- Simulación cuántica y metrología cuántica.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperatura.
- Interacciones de Van der Waals en ZIFs.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Métodos numéricos para la solución de ecuaciones no lineales acopladas.
- Desarrollo adiabático en hyperarmónicos esféricos.
- Grupo de renormalización.
- Métodos de control cuántico coherente.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

El Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado durante 2014 su trabajo sobre la cuantización de cosmologías inhomogéneas, centrando la atención en las consecuencias que la cuantización de la geometría tiene para las perturbaciones cosmológicas y en las huellas sobre el Fondo Cósmico de Microondas. Estudiamos la evolución de un espaciotiempo homogéneo e isótropo (un espaciotiempo de Friedmann-Robertson-Walker) acoplado a un campo escalar sin masa con perturbaciones escalares pequeñas dentro del marco de la Cosmología Cuántica de Campos, usando una propuesta para la dinámica efectiva que se basa en una cuantización híbrida que previamente habíamos logrado nosotros. Introdujimos una fijación de gauge conveniente y adoptamos variables canónicas reducidas adaptadas a esa

descripción cuántica híbrida. Además, mantuvimos las contribuciones de backreaction sobre el fondo (background) procedentes de los términos de la acción del sistema cuadráticos en las perturbaciones. Llevamos a cabo un análisis numérico asumiendo que las inhomogeneidades estaban inicialmente (en el pasado distante) en un vacío sin masa. En el futuro distante, observamos una amplificación estadística de la amplitud de los modos en la región infrarroja, así como una sincronización de las fases debida a fenómenos de gravedad cuántica. Finalmente, analizamos algunas consecuencias de la backreaction en nuestra descripción efectiva.

También estudiamos perturbaciones cosmológicas en el marco de la Cosmología Cuántica de Lazos usando variables de Mukhanov-Sasaki en el formalismo de cuantización híbrida. La formulación en términos de estos invariantes de gauge permite clarificar la independencia de los resultados en elecciones de gauge y facilita la comparación con otros formalismos propuestos para tratar las perturbaciones cosmológicas en el contexto de la Teoría Cuántica de Lazos. Empleamos un tipo de aproximación de Born-Oppenheimer para extraer la dinámica de las perturbaciones, separándolas de los grados de libertad de la geometría de Friedmann-Robertson-Walker. Con esta aproximación, dedujimos una ecuación de Schrödinger para las perturbaciones cosmológicas y estudiamos su rango de validez. Asimismo, probamos que, con un orden de factores diferente, la dinámica de las perturbaciones que se obtenía era similar a la encontrada en el llamado formalismo de “métrica vestida”, salvo por un posible escalado del campo material para garantizar la unitariedad de su evolución en el régimen de Teoría Cuántica de Campos en un espaciotiempo curvo, y aparte de algunas cuestiones de prescripciones de la cuantización. Finalmente, calculamos las ecuaciones efectivas que resultan gobernar las variables de Mukhanov-Sasaki, tanto con la aproximación de Born-Oppenheimer como sin ella.

Además de todo esto, y para poder contemplar la posibilidad de cambios de signature en la geometría cuántica, estudiamos la cuantización de campos escalares de tipo Klein-Gordon en espaciotiempos no estacionarios, como los que se encuentran en cosmología, suponiendo que toda la dependencia espacial relevante para las ecuaciones de campo estaba contenida en el laplaciano. Mostramos que la descripción de campo y la representación de Fock para la cuantización del campo quedan fijadas de forma única (salvo por transformaciones unitarias que no afectan las predicciones físicas) si se adopta un criterio combinado de (a) imponer la invariancia del vacío bajo el grupo de simetrías espaciales de las ecuaciones de campo y (b) requerir una implementación unitaria de la dinámica en la teoría cuántica. También proporcionamos una interpretación espaciotemporal de las ecuaciones de campo como las correspondientes a un campo escalar en un espaciotiempo cosmológico que es conformemente ultraestático. En la cuantización de Fock privilegiada, investigamos la generalización de la evolución de los estados físicos desde el régimen de dinámica hiperbólica a un régimen elíptico, debido a procesos con cambio de signature en el espaciotiempo en el que se propaga el campo. Discutimos el comportamiento de la geometría de fondo cuando ocurre el cambio, y probamos que la métrica del espaciotiempo degenera totalmente. Finalmente, mostramos que este tipo de cambio de signature conduce de forma natural a un fenómeno de creación de partículas, con una producción exponencial.

En nuestro estudio de inhomogeneidades en Cosmología Cuántica de Lazos, por otra parte, también desarrollamos métodos aproximados en la cuantización híbrida del modelo de Gowdy con polarización lineal y un campo escalar sin masa, para el caso de una topología espacial toroidal en tres dimensiones. Los modelos de Gowdy son espaciotiempos cosmológicos inhomogéneos con simetrías que simplifican el análisis. La Cuantización de Lazos del sector gravitatorio homogéneo del modelo de Gowdy y la presencia de inhomogeneidades conducen a una ligadura hamiltoniana muy complicada. Por tanto, la extracción de resultados físicos reclama la introducción de aproximaciones bien justificadas. Primero mostramos cómo aproximar la parte homogénea de la ligadura hamiltoniana, correspondiente a geometrías anisótropas de tipo Bianchi I, como si se trataran de un modelo isótropo de Friedmann-Robertson-Walker corregido con anisotropías. Esta aproximación es válida en el sector de altas energías de la geometría de Friedmann-Robertson-Walker y cuando la función de ondas de las anisotropías es suficientemente suave. Además, para ciertas familias de estados relacionados con regímenes de interés físico, con efectos cuánticos de las anisotropías despreciables e inhomogeneidades pequeñas, es posible aproximar la ligadura hamiltoniana del sistema por el de una geometría de Friedmann-Robertson-Walker con un contenido material simple, y así obtener soluciones aproximadas.

Por otra parte, hemos discutido también el problema de la existencia de correlaciones cuánticas en la geometría más allá de horizontes gravitatorios. Clásicamente, regiones diferentes del espaciotiempo que están separadas por horizontes no se relacionan entre sí. Llevamos a cabo una cuantización canónica de un modelo de tipo Kantowski-Sachs cuyas soluciones clásicas exhiben tanto un horizonte de sucesos como uno cosmológico, para comprobar así si la afirmación anterior sobre regiones separadas por horizontes se mantenía desde el punto de vista cuántico. Nuestro análisis mostró que, en realidad, no sucede así. Estado gravitatorios cuánticos con soporte en configuraciones espaciotemporales que describen exclusivamente bien la región entre horizontes, bien la región externa, no son consistentes en tanto en cuanto resultan conectarse entre sí mediante operadores unitarios que describen una noción natural de evolución.

También hemos dado una descripción detallada de la electrodinámica como una teoría emergente a partir de estructuras similares a las que aparecen en materia condensada, no solo por su interés intrínseco sino también como preparación para el estudio mucho más complejo de la gravedad. Comenzamos con el modelo mecánico de Maxwell para la electrodinámica. A continuación tomamos un sistema similar al helio 3 superfluido como representante de una clase amplia de sistemas cuánticos fermiónicos cuya física de baja energía reproduce la electrodinámica clásica.

El sector de agujero blanco de la solución de Kruskal casi nunca se utiliza en aplicaciones físicas. Sin embargo, podría contener la solución a muchos de los problemas asociados con el colapso gravitatorio y la evaporación subsiguiente. Existen geometrías de rebote que hacen un uso democrático de los sectores de agujero negro y de agujero blanco. Estos comportamientos podrían ser naturales en el siguiente nivel más allá de la relatividad general.

En otro ámbito de cuestiones, se acepta comúnmente que la relatividad general es la única solución al problema de consistencia en la construcción de una teoría de gravitones (partículas de espín 2 sin masa) en interacción. Presentamos el problema de autoacoplo en detalle y lo resolvimos explícitamente para la teoría más simple. Hicimos explícito el problema de la no unicidad y mostramos que la única teoría resultante que implementa una deformación de la simetría gauge original tiene esencialmente la misma estructura que la gravedad unimodular, lo que permite pensar en una solución natural para el primer problema de la constante cosmológica en teorías de gravedad emergente. Después analizamos la teoría de Fierz-Pauli theory (equivalente pero con más simetría gauge). Mediante el requisito de que se preserve una deformación de la simetría gauge interna, se recupera naturalmente la estructura de la gravedad unimodular de la relatividad general pero en una versión que exhibe la estructura minkowskiana subyacente (al estilo de la teoría bimétrica de Rosen).

Una de las características más peculiares de la cuantización utilizada en la Gravedad Cuántica de Lazos es la no-separabilidad de los espacios de Hilbert utilizados. Se espera que esto no sea un problema en la formulación final de la gravedad cuántica porque los espacios físicos de Hilbert determinados por las soluciones a las ligaduras cuánticas serán, muy probablemente, separables. En cualquier caso, hay una serie de cuestiones que no han sido contestadas de manera completamente satisfactoria y que, por lo tanto, es interesante abordar: en particular, la mecánica estadística de estos modelos, la superselección de ciertos espacios de Hilbert y la caracterización de las ambigüedades introducidas por la escala polimérica. Un entorno natural para estudiar estas cuestiones es el proporcionado por la denominada mecánica cuántica polimérica, que incorpora algunas de las características más singulares de la cuantización de la relatividad general que nos da la GCL y es especialmente relevante para la Cosmología Cuántica de Lazos. En los últimos años hemos prestado atención al estudio de los sistemas simples, como el oscilador armónico polimerizado en una dimensión, con la esperanza de lograr una buena comprensión de la no-separabilidad. En el último año hemos considerado, en colaboración con el Dr. Tomasz Pawłowski —antiguo miembro del grupo— la extensión de algunos de nuestros resultados al estudio de modelos en cosmología cuántica. La idea clave ha sido la de sustituir los espacios no separables por otros separables, con medidas adecuadas sobre el espectro de los operadores relevantes para definir observables cuánticos. Aunque esta idea puede ser finalmente demasiado sencilla, es bastante útil para entender no separabilidad y cuestiones relacionadas con superselección.

El trabajo llevado a cabo por el grupo sobre entropía de agujeros negros en LQG durante los últimos años llevó al desarrollo de varias herramientas matemáticas necesarias para resolver los problemas combinatorios involucrados en el cálculo de la entropía. Un resultado de tipo matemático que ha tenido su origen en esos trabajos nos ha llevado a la resolución de un antiguo problema de combinatoria que aparece formulado en el famoso libro *Concrete Mathematics* de Graham, Knuth y Patashnik. El problema en cuestión pide resolver y caracterizar las soluciones a una recurrencia lineal de seis parámetros muy general cuyas soluciones incluyen a grandes familias de números combinatorios conocidos; entre ellos los coeficientes binomiales, los números de Stirling, los números de Euler y muchos otros. La resolución de este problema se ha basado en el uso de funciones generatrices de dos variables similares a las utilizadas por el grupo para estudiar los agujeros negros. Un descubrimiento sorprendente ha sido la identificación de un fenómeno que es natural denominar *invariancia de gauge* y que consiste en la existencia de diferentes conjuntos de parámetros que conducen a las mismas familias de números combinatorios. El trabajo ha sido publicado en la prestigiosa revista *Journal of combinatorial Theory, Series A* y ha dado lugar a un nuevo trabajo sobre las aplicaciones del formalismo que hemos desarrollado (enviado a publicar al *Electronic Journal of Combinatorics*).

Un problema importante sugerido también por la actividad del grupo en física de agujeros negros es el estudio riguroso de la formulación hamiltoniana para teorías de campos en la presencia de fronteras. Recuérdese que el modelo utilizado actualmente para describir los agujeros negros en el marco de la GCL se basa en la utilización de los llamados *horizontes aislados* y la formulación de la relatividad general en regiones de espacio-tiempo con fronteras interiores. El origen de los grados de libertad cuánticos que dan cuenta de la entropía es algo misterioso y, en particular, la relación entre los grados de libertad clásicos y cuánticos no está completamente clara. Con el objetivo de aclarar este tema y alcanzar una comprensión rigurosa de la relatividad general en presencia de fronteras espacio-temporales hemos comenzado a estudiar la formulación hamiltoniana rigurosa para teorías de campos en regiones espaciales acotadas. Uno de los objetivos de este trabajo ha sido el de caracterizar aquellas teorías de campos para las que aparecen de forma natural grados de libertad asociados con fronteras. El primer trabajo sobre este tema, publicado en *Classical and Quantum Gravity* y distinguido como *highlight* del año 2014 por esta prestigiosa revista, trata sobre el estudio de campos escalares y electromagnéticos en regiones acotadas con fronteras suaves y determinadas por condiciones de contorno de distintos tipos (Dirichlet, Neumann, Robin y otras específicas del campo EM). En estos ejemplos hemos sido capaces de demostrar rigurosamente que no aparecen grados de libertad en las fronteras. En este momento estamos extendiendo los resultados de este trabajo al estudio del campo escalar parametrizado y a modelos de campos acoplados a partículas puntuales. Estos trabajos —en curso o en proceso de publicación— arrojarán más luz sobre la

cuestión de la existencia de auténticos grados de libertad asociados a fronteras espaciotemporales y la entropía de los agujeros negros.

Dentro del marco de cosmología cuántica de lazos, se ha estudiado la posibilidad de obtener las ecuaciones homogéneas de LQC a partir de la teoría de campos de grupo, una teoría independiente del fondo y supuestamente más fundamental que la gravedad de lazos. En este caso, se ha usado un estado condensado cuántico para reproducir un fondo cosmológico en el límite continuo. Hemos también explorado otras teorías de gravedad cuántica, donde se ha hecho hincapié sobre el cambio de propiedades de la geometría efectiva al variar de la resolución. (i) En la teoría de gravedad no-local propuesta por G. Calcagni and L. Modesto, se ha construido una lagrangiana de gravedad in 11 dimensiones con operadores no-locales y que reproduce varias características de la teoría M y de campos de cuerdas. Con respecto a la cosmología, se ha mostrado que es posible remplazar la singularidad del big bang con un rebote clásico, por efecto de los operadores no-locales. Hemos también discutido la misma no-localidad de dichos modelos en teoría de cuerdas. (ii) Se han desarrollado la electrodinámica (clásica y cuántica) y la cosmología de espaciotiempos multi-escala, teorías recién propuestas donde la geometría cambia con la escala de manera similar a las de multi-fractales. La medida geométrica produce naturalmente un periodo de contracciones y expansiones cíclicas que puede dejar una huella única en los espectros de inflación primordial. La constante cosmológica que domina el universo reciente se reinterpreta como un “potencial” efectivo generado por la medida geométrica, necesario para la auto consistencia de las soluciones. (iii) Se han puesto cotas observacionales sobre modelos cosmológicos de geometría no-conmutativa, de brana y de tunneling cuántico, logrando excluir experimentalmente las primeras dos clases gracias a los datos de Planck. (iv) Se ha empezado el estudio de la dimensión espectral (que indica el número de dimensiones efectivas percibidas por una partícula de prueba) en gravedades cuánticas con geometrías discretas, incluso espumas de spin y gravedad de lazos.

Por ultimo, en el cluster Trueno hemos instalado y comprobado con éxito el programa FORTRAN CosmoMC de simulaciones de Monte Carlo cosmológicas. CosmoMC es un instrumento fundamental para poner cotas observacionales sobre modelos teóricos del universo primitivo y nos permitirá verificar experimentalmente y directamente las predicciones inflacionarias de muchos de los modelos aquí discutidos. El IEM-CSIC se convierte así en el primer nodo nacional equipado con este importante código de cosmología numérica.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Propiedades de desintegración en núcleos exóticos de interés astrofísico

Durante el año 2014 hemos continuado con el estudio de las propiedades de desintegración en núcleos con implicaciones en nucleosíntesis estelar. Se ha dedicado especial atención a los isótopos ricos en neutrones de masas intermedias que están involucrados en los procesos astrofísicos de captura rápida de neutrones (procesos r). Estos procesos están considerados en la actualidad como el mecanismo más importante de la producción de elementos pesados ricos en neutrones en el universo y se cree que más de la mitad de los elementos más pesados que el hierro tienen su origen en estos procesos estelares. Las propiedades de desintegración de los núcleos involucrados en estos procesos son por tanto de gran relevancia para entender la generación de elementos pesados, las posibles trayectorias de los procesos r y sus bifurcaciones y las respectivas abundancias finales tal y como son observadas en la naturaleza. Es por ello por lo que existe hoy en día una gran actividad en su estudio tanto teórico como experimental. Aunque existen grandes avances experimentales en los últimos años en el intento de caracterizar cada vez mejor las propiedades de estos núcleos, la mayor parte de estas propiedades son aún desconocidas debido a las bajas tasas de producción en el laboratorio para estos núcleos exóticos altamente inestables. Es por tanto necesario la utilización de modelos nucleares con poder predictivo para interpretar las observaciones astrofísicas para simular los procesos r.

La descripción teórica de la estructura nuclear en esta región de masa es muy interesante en varios aspectos siendo el más destacado los rápidos cambios estructurales observados en función del número de nucleones que hacen emerger fenómenos de coexistencia de forma nucleares con configuraciones esféricas, axiales e incluso triaxiales compitiendo por el estado fundamental. Estas propiedades están sustanciadas por observaciones espectroscópicas, momentos cuadrupolares de las bandas rotacionales y cambios en los radios de carga. En este trabajo hemos estudiado estas propiedades mediante modelos basados en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) con campos medios obtenidos autoconsistentemente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme (SLy4) y correlaciones de apareamiento. Se incluyen así mismo fuerzas residuales de tipo espín-isospín tanto en el canal partícula-hueco como en el canal partícula-partícula. En primer lugar estudiamos las superficies de energía que nos muestran la energía como función de la deformación nuclear para así determinar las formas de equilibrio en cada uno de los isótopos estudiados. Posteriormente y para cada una de estas posibles deformaciones se estudian las distribuciones de intensidad Gamow-Teller (GT) mediante nuestra aproximación microscópica y con ellas se evalúan las vidas medias de desintegración medidas experimentalmente. El estudio se lleva a cabo para isótopos ricos en neutrones de Zirconio y Molibdeno incluyendo tanto isótopos pares como impares. Se analizan los distintos factores que influyen en la determinación de estas propiedades y se evalúan cuantitativamente para obtener finalmente predicciones para las vidas medias aún sin medir y para las distribuciones energéticas de la

intensidad GT que contienen la información detallada de la estructura nuclear y cuya determinación experimental está siendo evaluada en la actualidad.

Funciones de onda del continuo en sistemas de tres cuerpos: Resonancias, modos de desintegración y reacciones

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

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

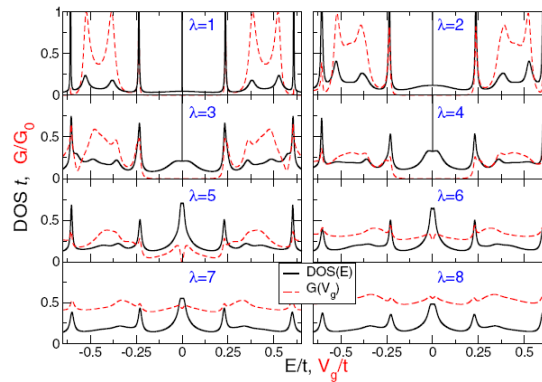
SISTEMAS MESOSCÓPICOS Y FUERTEMENTE CORRELACIONADOS

Transporte cuántico

Los efectos de interferencia son responsables de alguna de las sorpresas de la física cuántica. En los primeros años desde el descubrimiento de la mecánica cuántica, Von Neumann y Wigner demostraron que en algunos casos particulares de potenciales con oscilaciones espaciales aparecían estados ligados en el continuo (BIC), esto es, soluciones de cuadrado integrable de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con autoenergías por encima del máximo del potencial. Los BICs se pueden formar por encima de la barrera debido a la interferencia destructiva entre las diferentes amplitudes de onda parciales que provoca que la función de onda se anule asintóticamente. Durante mucho tiempo se pensó que los BICs no eran más que una curiosidad matemáticas. Sin embargo, se han encontrado BICs en experimentos recientes en sistemas ópticos y actualmente el interés teórico en los BICs se ha renovado debido a sus posibles aplicaciones en información cuántica, transporte cuántico y almacenamiento de energía.

Hemos identificado una clase de sistemas muy general (sistemas con simetría quiral) que presentan BICs cuando se conectan con el continuo. En estos sistemas quirales cuánticos aparecen estados a energía cero en los que la función de onda únicamente tiene amplitud distinta de cero en uno de los subsistemas definidos por la simetría quiral. Cuando el sistema se acopla a través de unos contactos a una banda continua de energía, una parte de estos estados permanece ligada. Hemos derivado unas reglas algebraicas para el número de estos estados dependiendo de la dimensionalidad y rango del Hamiltoniano. Hemos examinado las propiedades de transporte de estos sistemas incluyendo la aparición de resonancias de Fano en casos límite. También, hemos propuesto diversos montajes experimentales para medirlos y comprobar nuestras predicciones basados en resonadores de microondas y átomos en redes ópticas.

Transporte cuántico. Densidad de estados (DOS, líneas negras) y conductancia (líneas rojas) para una red cuadrada de 10×10 sitios conectada con cables de diferente tamaño, $\lambda=1,2,\dots,8$. Nótese el pico en la DOS en el centro de la banda, $E=0$, mientras la conductancia es cero para $\lambda \leq 4$, lo que indica la presencia de BICs. Figura de J. Mur-Petit, R.A. Molina, *Phys. Rev. B* **90**, 035434 (2014).



Campos medios jerárquicos

La Teoría de Campos Medios Jerárquicos (HMFT) parte de un mapping exacto entre los estados de un conjunto de espines pertenecientes a un cluster en una red de una o más dimensiones y un sistema de bosones compuestos, cuyos grados de libertad internos tienen una relación biunívoca con los estados del espacio de Hilbert del cluster. El Hamiltoniano de bosones compuestos así obtenido, se trata en campo medio. De esta manera, la correlaciones de corto rango contenidas en el cluster se describen exactamente y solo las interacciones entre clusters se aproximan en campo medio. Con esta herramienta estudiamos el diagrama de fases a temperatura cero de un sistema de bosones hard-core en una red cuadrada bidimensional a densidades arbitrarias (*Physical Review B* **89**, 094401 (2014)). En el régimen frustrado, donde Monte Carlo sufre problemas de signo, encontramos un rico diagrama de fases en el que emergen estados exóticos quirales. Entre ellas, nuevas fases aislantes caracterizadas por quiralidad y orden de plaquetas. En el régimen no frustrado, HMFT mejora los resultados de campo medio estándar y captura la transición de superfluido a sólido valence bond de acuerdo con cálculos de Monte Carlos.

Por otro lado, hemos extendido el HMFT a sistemas fermiónicos en redes de una y dos dimensiones (*Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 455601 (2014)). Para ello introducimos un mapping canónico que transforma operadores de creación o destrucción de fermiones físicos en productos cuadráticos de bosones y fermiones compuestos. Cada una de estas partículas compuestas representa un estado de muchos cuerpos en el espacio de Fock de un cluster. Desde un punto formal, demostramos que el mapping a bosones y fermiones compuestos (CBFM) preserva los elementos matriz los operadores físicos cuando se impone una restricción tipo hard-core sobre las partículas compuestas que viven en cada cluster.

En una primera aplicación, estudiamos el modelo de Hubbard en redes de 1D y 2D. El Hamiltoniano resultante, que mezcla bosones y fermiones compuestos, se trató en un esquema de campo medio que desacopla la partes bosónicas y fermiónicas. En 1D se comparó con resultados exactos del ansatz de Bethe a llenado medio. En estas condiciones, el estado fundamental está en la fase de Mott para cualquier interacción U finita. Se verificó que el campo medio de bosones y fermiones compuestos describe muy bien la fase aislante. Sin embargo en 2D, el tratamiento del Hamiltoniano de partículas compuestas tiene dificultades para describir la fase metálica.

Modelos exactamente solubles

A partir de una clase de Hamiltonianos de pairing integrables, presentamos una variante del cable de Kitaev, el modelo de Richardson-Gaudin-Kitaev (RGK) que conserva el número de fermiones y es explícitamente interactuante para condiciones de contorno periódicas y antiperiódicas (*Physical Review* **113**, 267002 (2014)). El modelo exactamente soluble de RGK es una realización particular de la familia hiperbólica de modelos de Richardson-Gaudin que fueron previamente aplicados a describir superconductividad de onda p en redes 2D. Nuestra solución exacta permite identificar cambios de paridad fermionica que caracterizan de forma unívoca superconductividad topológica en sistemas genéricos de muchos cuerpos. Aunque los modos cero de Majorana tienen un confinamiento que sigue una ley de potencias, podemos definir operadores de Majorana de muchos cuerpos ajustando el flujo a un cruce de paridad. Derivamos una expresión cerrada para el invariante topológico y mostramos que la transición de fase topológica es de tercer orden. La gran relevancia de este modelo de RGK reside en el hecho de que este provee una función de onda de muchos cuerpos exacta para un problema que hasta ahora solo pudo ser tratado en campo medio.

Semimetales de Dirac en tres dimensiones

Hemos investigado los efectos de la interacción electrónica en semimetales de Dirac en tres dimensiones, con el propósito de localizar las diferentes fases de dichos sistemas dependiendo de la intensidad de la interacción de Coulomb. El interés por este tema proviene del reciente descubrimiento de materiales tridimensionales con dispersión electrónica lineal en las tres direcciones del momento, proporcionando así un análogo del grafeno en una dimensión superior. Estos sistemas en tres dimensiones reciben el nombre de semimetales de Dirac, remarcando que sus

cuasipartículas de electrón incorporan una invariancia de tipo relativista que simula la simetría de las partículas elementales en física de altas energías. A este respecto, los semimetales en tres dimensiones están gobernados por una versión modificada de la Electrodinámica Cuántica (QED) en la que la velocidad de la luz se ve reemplazada por la velocidad de Fermi de las cuasipartículas de electrón, proporcionando de esta manera un ejemplo de sistema electrónico con inclinación natural a colocarse en el régimen de acoplo fuerte.

Con el fin de estudiar las propiedades de la teoría con interacción fuerte, hemos empleado en primer lugar un método analítico dedicado a obtener la renormalización de los principales parámetros físicos, como son la velocidad de Fermi y el peso de las cuasipartículas. En esta tarea, hemos llevado a cabo un desarrollo de tipo $1/N$, suponiendo formalmente el caso de un gran número N de fermiones de Dirac, lo que ha permitido obtener la dependencia con la escala de energía de los diferentes parámetros renormalizados. Así, calculando la dimensión anómala del campo del electrón y la dependencia de escala de la velocidad de Fermi, hemos podido demostrar que la teoría tiene un acoplo crítico para un valor determinado de la intensidad de la interacción (expresada como la razón entre el cuadrado de la carga del electrón y la velocidad de Fermi). Hemos encontrado que el punto crítico está caracterizado por la supresión del peso de las cuasipartículas en el límite de baja energía, siguiendo un comportamiento en el que la velocidad de Fermi permanece acotada. Esto representa una nueva fase en la QED de los semimetales de Dirac, que en dos dimensiones espaciales (sistemas como el grafeno) están en cambio caracterizados por la divergencia de la velocidad de Fermi para acoplo débil y por el desarrollo de una inestabilidad excitónica en acoplo fuerte. El comportamiento ahora descubierto en los semimetales de Dirac tridimensionales cae de hecho dentro de la clase de líquidos de Fermi marginales, propuesta hace algún tiempo para entender las propiedades no convencionales del estado normal de los superconductores de alta temperatura crítica, y teniendo como peculiaridad distintiva una fuerte atenuación de las cuasipartículas de electrón.

Por otra parte, el estudio de las fases de los semimetales de Dirac tridimensionales para N no muy grande ha requerido el uso de un método complementario, basado en la resolución de las ecuaciones de Schwinger-Dyson de la correspondiente QED. Este es un método no perturbativo que ha de ser aplicado en general con algún tipo de truncación para garantizar su viabilidad práctica. En este respecto, nos hemos apoyado en una formulación de las ecuaciones que equivale a incluir todo tipo de contribuciones diagramáticas, excepto las que contienen correcciones de tipo vértice. Para establecer una conexión con los resultados obtenidos previamente por renormalización de los parámetros de cuasipartícula, hemos llevado a cabo una resolución autoconsistente para el propagador de Dirac, caracterizado por expresiones dependientes de la frecuencia y el momento para el peso de la cuasipartícula, la velocidad de Fermi y, adicionalmente, una masa para el fermión de Dirac. Con este procedimiento, se ha conseguido la resolución recursiva de las ecuaciones integrales alcanzando convergencia después de un conjunto de 20-30 iteraciones. Para valores pequeños de N , hemos encontrado que la solución de las ecuaciones muestra la generación espontánea de una masa del fermión para acoplo fuerte, señalando la aparición de un régimen con ruptura de la simetría quiral que es semejante a una fase bien conocida de los semimetales de Dirac bidimensionales. Para valores intermedios o grandes de N , sin embargo, hemos visto que el sistema sufre una transición para interacción suficientemente fuerte con supresión de las cuasipartículas de electrón, en acuerdo con los resultados de la aproximación analítica de gran N . La resolución autoconsistente ha hecho también posible el estudio del comportamiento del sistema más allá del punto de la transición, permitiendo caracterizar con precisión las propiedades de un líquido de electrones fuertemente renormalizado y, de esta manera, proporcionando un paradigma valioso para otros casos de materiales mostrando comportamientos que no son de tipo líquido de Fermi.

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

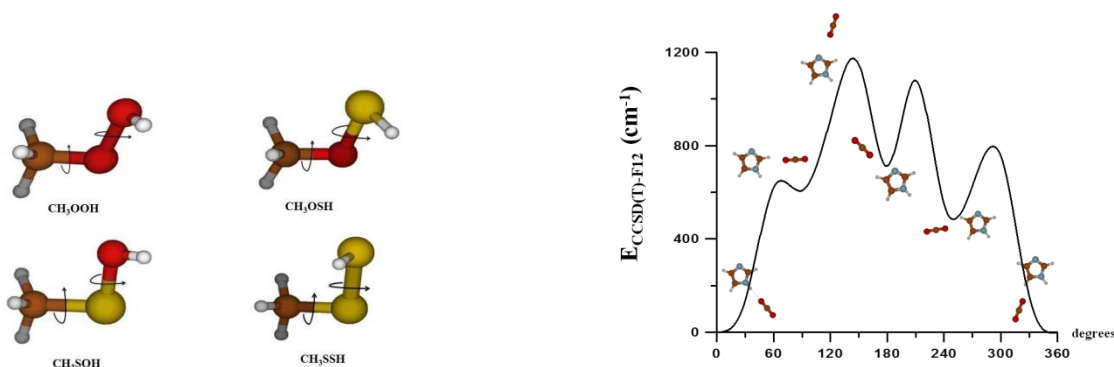
El grupo emplea métodos ab initio altamente correlacionados para caracterizar especies moleculares y procesos químicos de interés astrofísico, así como para describir nuevos materiales con aplicación a la captación de CO_2 .

Durante el año 2014 hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en tres sub-líneas de investigación: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas y determinación de secciones eficaces en colisiones inelásticas no reactivas a muy bajas temperaturas. Empleamos siempre, como herramienta básica, métodos ab initio de alto nivel para determinar estructuras moleculares y superficies de energía potencial. A partir de estas y de nuestros códigos rovibracionales ENEDIM y FIT-ESPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Con cálculos de dinámica molecular close-coupling determinamos propiedades colisionales a partir de las superficies de Van-der-Walls. Todos los sistemas son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias.

Desde 2004, hemos realizado estudios muy detallados y completos dirigidos a la caracterización de cadenas carbonadas de importancia astrofísica aumentando progresivamente la complejidad de los sistemas estudiados. Estas cadenas se consideran relevantes tanto como especies aisladas como intermediarios de reacciones de formación de grandes moléculas como son los PAHs o los fullerenos. Para caracterizar cadenas de pequeño tamaño, se han empleado métodos muy precisos. Inicialmente estudiamos cadenas puras tipo C_n con un número de átomos n reducido ($n=4,5$). Estas

especies que no tienen momento dipolar permanente son susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo. En el infrarrojo lejano se pueden observar a través de sus movimientos de flexión. Durante 2013, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_6N en colaboración con investigadores de la Universidad King Saud de Ryad. También hemos estudiado los procesos de formación de los aniones tipo $C_nX_m^-$ ($X=N, H$) recientemente detectados en regiones circunestelares. Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son observables mediante radioastronomía. Teniendo en cuenta la evolución de los estados electrónicos de baja energía a lo largo de los procesos de formación y destrucción de dichos aniones, hemos propuesto una regla general que permite predecir la detectabilidad de los aniones en fuentes astrofísicas. Para todas las cadenas carbonadas estudiadas, se han caracterizado estructuras isoméricas; se han calculado superficies de potencial para los primeros electrónicos estados electrónicos, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización así como intersecciones cónicas y efectos rovibrónicos.

Los nuevos observatorios radioastronómicos van a permitir detectar nuevas moléculas y nuevas variedades isotópicas siempre y cuando se conozcan sus espectros en las regiones milimétrica y submilimétrica. Los cálculos ab initio altamente correlacionados permiten determinar las estructuras de mínimo de dichas moléculas así como obtener conjuntos iniciales de parámetros espectroscópicos que pueden facilitar la asignación de dichos espectros. Especial interés tiene el cálculo para caracterizar espectroscópicamente especies prebióticas no-rígidas que presentan niveles vibracionales susceptibles de estar poblados a muy bajas temperaturas y que se pueden detectar en estados vibracionales excitados en zonas de formación estelar. Este año 2014, se ha prestado atención especial a las moléculas orgánicas que contienen azufre como el etil mercaptan y los derivados sulfurados del peróxido de metilo.



Por último y dentro del entorno de la Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, estamos realizando estudios de la interacción del CO_2 y del agua con imidazoles. Se trata de predecir la capacidad de materiales tipo ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) para la captación de residuos atmosféricos. Los cálculos moleculares (potenciales de interacción y estructuras) se aprovecharán en estudios posteriores de simulación de sólidos.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Espectroscopía sobre superficies.
- Óptica y Fotónica.
- Fotónica de plasmones superficiales y metamateriales.
- Bioespectroscopía.
- Físico-Química de los procesos de Deposición y ablación.
- Aplicaciones Biológicas de la Espectroscopía Vibracional

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad.
- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- I+D de electrónica multiplexado con regulación en función de cambio de temperatura.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para Fuentes de neutrones.
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SERS, SEF y SEIRA) sobre nanoestructuras metálicas.
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico.
- Espectroscopías SERS, SEF y SEIRA aplicadas a la detección de contaminantes y sustancias empleadas en dopaje deportivo.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas): Raman y fluorescencia.
- Metamateriales en el dominio óptico.
- Nanofotónica de nanohilos semiconductores.
- Espectroscopía de Plasmas de Ablación inducidos por Radiación láser Infrarroja.
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica en plasmas inducidos por Láser (LIBS).
- Identificación de marcadores espectroscópicos infrarrojos y Raman para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas y neoplásicas.
- Estructura molecular de proteínas y lípidos en alimentos funcionales.
- Aplicación al Estudio de la Nanoestructura de los Conglomerantes Artificiales

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Diseño mecánicas en CATIA.
- Métodos computacionales y Matemáticas.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Simulación Numérica.
- Métodos Computacionales.
- Dispersión de neutrones.
- Técnicas calorimétricas.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Espectroscopía Infrarroja (Normal, FTIR, micro IR y SEIR).
- Espectroscopía Infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM) y de Barrido (SEM).
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica) y Cálculos Numéricos.
- Espectroscopía Infrarroja (FTIR).
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica (LIBS).
- Espectroscopía Raman (FT1, Normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia inducida por láser (LIF).
- Deposición Asistida por Láser.
- Análisis Estadístico Multivariante.
- Espectroscopía Raman.
- Técnicas de Imaging resueltas espacial y temporalmente.

LABOR INVESTIGADORA:

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

ESTUDIOS DE LA SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$

(Proyecto FPA2012-32443 (contratado M. Carmona-Gallardo, Olof Tengblad)

En nuestro grupo estamos interesados en el estudio experimental de la reacción nuclear ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ debido a su importancia astrofísica en el Modelo Solar estándar y en el Nucleosíntesis del Big-Bang. En particular, estamos interesados en la determinación de la sección eficaz de dicha reacción a energías intermedias, dadas las discrepancias existentes entre las medidas previas en este rango, y a la influencia de las mismas en los modelos teóricos necesarios para extrapolar a las bajas energías de interés astrofísico.

Con el objetivo de corroborar nuestras medidas experimentales (realizadas utilizando el método de activación M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)) así como para resolver las discrepancias entre medidas anteriores, realizamos un experimento en la instalación TRIUMF, en Vancouver. En este caso las medidas se realizaron mediante la técnica de detección directa de los productos de la reacción. Para ello, utilizamos el espectrómetro DRAGON que nos permitía separar los iones de ${}^7\text{Be}$ procedentes de la reacción del haz de ${}^4\text{He}$ que no interaccionaba con el blanco.

Una de las variables determinante en este caso es la aceptación total del separador para esta reacción, puesto que la apertura de los iones de ${}^7\text{Be}$ sobrepasa la aceptación geométrica de DRAGON. Para su evaluación se han realizado simulaciones con el código DRAGON GEANT 3 con el que se han reproducido las condiciones experimentales estudiando la sensibilidad del separador a los diferentes parámetros de entrada. Además, se ha finalizado el análisis de los datos experimentales.

Los resultados obtenidos utilizando las dos técnicas complementarias muestran concordancia y resuelven las discrepancias existentes entre los datos anteriores. Además, corroboran los primeros cálculos ab-initio sobre esta reacción realizados por T. Neff (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

Dichos estudios constituyen la tesis doctoral titulado “**Estudios experimentales de la reacción nuclear con interés astrofísico $3\text{He}(\alpha,\gamma){}^7\text{Be}$** ” de Mariano Carmona Gallardo que fue defendida el 4 de Julio del 2014 en Universidad Complutense de Madrid.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DIPOLAR DE NÚCLEOS LIGEROS

Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear reciente ha sido la existencia de un halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de estabilidad (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 (o clúster/grupo de

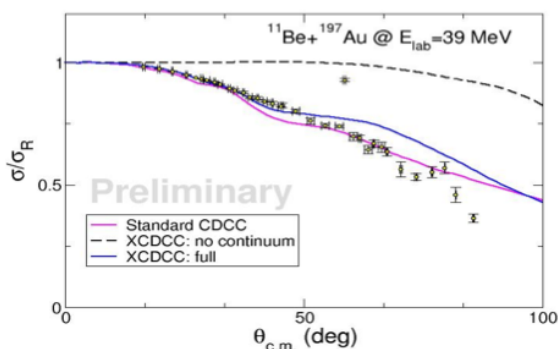
nucleones) alejarse y tener una probabilidad no despreciable a distancias mucho mayores que el radio nuclear normal aumentando su polarizabilidad.

El parámetro de polarizabilidad es una propiedad fundamental del núcleo y es una medida de su respuesta a un campo eléctrico externo. En el límite adiabático (que corresponde a energías de excitación altas), la sección eficaz de dispersión elástica se desvía de la predicción de la fórmula de Rutherford proporcionalmente a la intensidad de la polarizabilidad dipolar. Por lo tanto, al medir la sección eficaz de dispersión elástica de un núcleo contra un blanco pesado a energías sub-Colombianas, podemos determinar el parámetro de polarizabilidad de éste núcleo. Este año hemos terminado el análisis del experimento S1202 sobre ^{11}Be , los avances se explican en la continuación.

EXPERIMENTO S1202: ESTUDIOS DEL EFECTO HALO EN LA DISPERSIÓN DE ^{11}Be CON UN BLANCO PESADO

(Proyecto FPA2012-32443 (Contratado doctorando Vicente Pesudo, Angel Perea, Olof Tengblad)

Durante 2014 se han llevado a cabo una intensa actividad investigadora para terminar el análisis de este experimento. También hemos participado y puesto nuestro sistema de detección a disposición del grupo del Prof. F. Sarazin de Colorado Schools of Mines para el experimento S1429 donde se estudia la reacción $^{11}\text{Be} (^9\text{Be}, ^8\text{Be})^{12}\text{Be}$. Vicente Pesudo, está finalizando el análisis del estudio de la reacción $^{11}\text{Be} (^{197}\text{Au}, ^{197}\text{Au})^{10}\text{Be}+n$ a energías alrededor y por debajo de la barrera Coulombiana, siendo capaz de extraer valiosos datos experimentales en todo el rango angular de 13° a 150° .



Se han realizado cálculos CDCC (Continuum Discretised Coupled Channel) que reproducían los datos experimentales en todo el rango angular para una energía, pero dejaban entrever las limitaciones de un modelo de dos cuerpos inertes para describir el ^{11}Be .

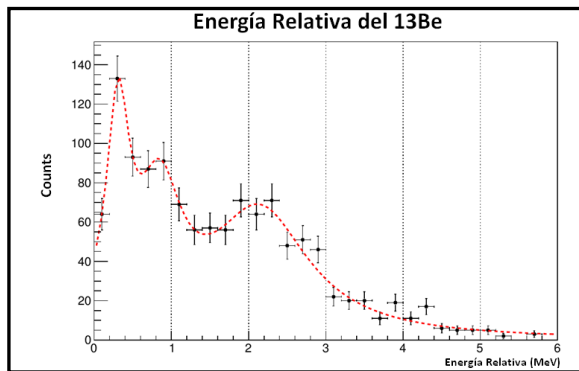
Parte de los resultados fueron presentados en el congreso NS2014 en Vancouver Canada <https://indico.triumf.ca/conferenceOtherViews.py?view=standard&confId=1748> y un artículo con una visión completa de la reacción está preparándose para una próxima publicación. Los resultados de esta reacción nuclear constituyen el trabajo de tesis de Vicente Pesudo que será defendida en la primavera de 2015.

EXPERIMENTO S393 R3B@GSI: NÚCLEOS RICOS EN NEUTRONES MÁS ALLÁ DE LA LÍNEA DE GOTEÓ.

(Proyecto FPA2012-32443, doctorando FPI2010 G. Ribeiro, Olof Tengblad)

En el contexto de la colaboración internacional R3B, hemos estudiado haces radioactivos acelerados a energías de 490 MeV/u dejándoles impactar sobre un blanco de protones (CH_2) para poder estudiar reacciones de transferencia de nucleones y así producir un cóctel de núcleos ligeros muy exóticos. La tesis doctoral de G. Ribeiro está enfocada al análisis de este experimento, en concreto a los núcleos más allá de la línea de goteo de neutrones. En este último año ha estado completando el análisis del núcleo no-ligado ^{13}Be que se produce de la reacción entre el haz de ^{14}B y el blanco de protones antes mencionado. En este tipo de experimentos de física nuclear se utiliza la técnica de cinemática completa, lo que quiere decir que se registran todos los parámetros de energía, tiempo y posición posibles tanto del haz entrante como de los fragmentos dispersados tras el blanco. Para garantizar la detección de los núcleos más allá de la línea de goteo de neutrones, como el ^{13}Be , es necesaria este tipo de técnica, ya que la vida media de estos isótopos es tan breve que no es posible detectarlos directamente, sino que debemos reconstruir su composición a partir de las señales que dejan sus productos de desintegración.

El estudio de este tipo de resonancias aporta información sobre fenómenos exóticos que aparecen en los límites de la carta de núcleos como los estados no-ligados, los halos o en algunos casos nuevos números mágicos. El análisis de la estructura del núcleo ha terminado y G. Ribeiro está escribiendo la tesis en estos momentos para defenderla este año. Ha dedicado mucho esfuerzo a explicar los métodos utilizados y los resultados previos en diferentes conferencias y charlas a lo largo del año, como resultado de esto hay tres artículos pendientes de publicación en las revistas de actas de dichas conferencias.



Espectro de energía relativa entre el fragmento de ^{12}Be y el neutrón perdido. Este histograma permite extraer información sobre los estados que han sido poblados en la reacción.

EXPERIMENT IS577: Nuclear structure study of ^{31}Ar at ISOLDE

(Proyecto FPA2012-32443 doctorando FPI2013 Irene Marroquín, Ángel Perea, Enrique Nácher)

En la desintegración beta de los núcleos exóticos, alejados de la estabilidad, el núcleo hijo puede encontrarse en un estado excitado, siendo inestable frente a la emisión de partículas. Este fenómeno es llamado emisión beta-retardada de partículas y es debido a un alto valor del calor de reacción Q y poca energía de separación para la emisión de partículas. La desintegración del núcleo ^{31}Ar , cercano a la línea de goteo de protones, es uno de los decaimientos más exóticos por emisión retardada de partículas. Tiene una gran ventana Q_β y como consecuencia muchos y diferentes canales de decaimiento beta-retardado están abiertos: $\beta\gamma$, βp , $\beta p\gamma$, $\beta 2p$, $\beta 2p\gamma$, $\beta 3p$ y quizás también $\beta 3p\gamma$.

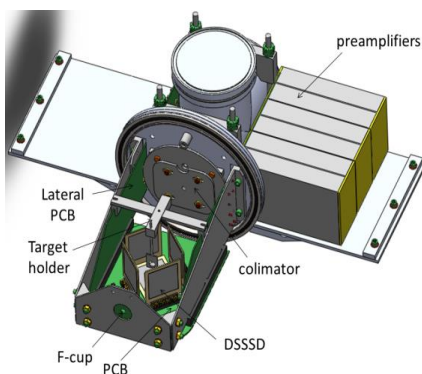
Los objetivos del experimento IS577 realizado este pasado octubre en IDS (ISOLDE Decay Station), fueron la identificación de las desintegraciones $\beta 3p$ in el núcleo ^{31}Ar además de aportar información importante sobre las resonancias de ^{30}S and ^{29}P .

IDS es una estación permanente dedicada a las medidas de decaimiento beta en ISOLDE. Nuestro grupo ha desarrollado y instalado una nueva cámara de detección para esta instalación; el *MAGISOL Si-Plugin Chamber*, compuesta de 5 detectores de silicio multi-segmentados (Double Sided Si Strip Detectors, DSSD) en configuración telescopio ΔE -E, con el fin de llevar a cabo los experimentos de decaimiento por emisión de partículas.

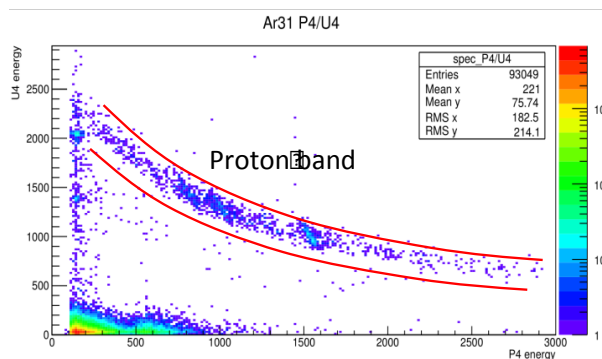
Este set-up es compacto con una gran eficiencia para la detección de emisión de partículas y con una baja energía mínima de detección (cut-off energy). Además, la estación IDS incluye 4 detectores de germanio (HPGe) segmentados que rodean la cámara para la detección de rayos gamma con alta eficiencia.

Este experimento sobre la desintegración beta de ^{31}Ar fue realizado bajo la colaboración internacional MAGISOL (Madrid-Aarhus-Gothenburg-ISOLDE). Nuestro grupo comparte equipamiento y estudiantes de manera regular con el grupo de Física Subatómica en la universidad de Aarhus (Dinamarca) y con el grupo de Física Subatómica, en el departamento de Física Fundamental de la Universidad tecnológica de Chalmers (Suecia). La tesis de la estudiante de doctorado Irene Marroquín, está centrada en la preparación, participación y análisis de este experimento.

MAGISOL Si-Plugin Chamber



Configuración telescopio ΔE -E: identificación de partículas



INSTRUMENTACIÓN PARA FAIR: AVANCES EN LA DETECCIÓN DE PROTONES DE ALTA ENERGÍA EN R3B

(Proyecto GANAS: ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333 (E. Nácher, O. Tengblad, A. Perea, A. Garzón, J. Sánchez del Río)

En el grupo trabajamos en el diseño, simulación y construcción de un calorímetro para radiación gamma y protones que se instalará en la instalación futura FAIR. La parte frontal de este calorímetro recibirá radiación y partículas cargadas de muy alta energía puesto que en las reacciones nucleares a energías relativistas los productos de la reacción salen principalmente hacia delante. Esta parte frontal, *Forward Endcap*, es responsabilidad de nuestro grupo, y en años anteriores hemos avanzado en el diseño y la implementación de los sub-detectores que lo formarán.

Contamos con un prototipo CEPA4 que consta de 4 detectores de centelleo individuales, formados cada uno de ellos por dos cristales: LaBr₃ y LaCl₃ acoplados ópticamente. En 2013 pudimos testear la respuesta de nuestro detector con protones de alta energía (hasta 230 MeV). Lo hicimos utilizando un ciclotrón de última generación recientemente instalado en Kracovia para aplicaciones médicas. Durante 2014 hemos analizado los datos y continuado mejorando las simulaciones de Geant 4 que ha terminado en un artículo “Proton response of CEPA4: A novel LaBr₃(Ce)–LaCl₃(Ce) phoswich array for high-energy gamma and proton spectroscopy” [Nuclear Instruments & Methods A769,105-111,\(2015\)](http://igfae.usc.es/~r3b/index.php?option=com_content&view=article&id=1&Itemid=2). También junto con nuestros colegas de la colaboración CALIFA hemos terminado y entregado el TDR (Technical Design Report) para la parte forward del espectrómetro CALIFA http://igfae.usc.es/~r3b/index.php?option=com_content&view=article&id=1&Itemid=2

Para tener una adquisición eficaz de los datos estamos haciendo I+D y caracterización de distintos módulos y procesos de digitación de las señales analógicas; probando distintos firmware DPP-PSD en la FPGA. Un modo ha sido usar NI LabView para realizar DPP-PSD (Digital Pulse Processing & Pulse Shape Discrimination) usando el ADC Caen V1742. Este programa, además del PSD, permite calcular los parámetros de tiempo de subida, tiempo de bajada, amplitud, energía total y energía de cola de las señales temporales digitalizadas por el V1742. Así, se podrá discriminar entre distintos tipos de partículas en detectores phoswich. Se hace medidas con fuentes gamma (60Co / 22Na / 137Cs) sobre distintos centelladores (CEPA4 / Pirámide) utilizando el digitizer (Caen DT5730): ajuste de parámetros del software propietario de Caen, digitalización de señales temporales, realización de histogramas (cálculo de resolución energética de los picos de las fuentes) y gráficas PSD (histograma 2D).

I+D de una sistema para la caracterización de foto-sensores LAPD (Large Area Photo Diodes). Se está llevando a cabo una caja con aislamiento lumínico y control térmico para comprobar la ganancia de cada LAPD en función de su tensión de alimentación y de la temperatura.

ESPECTROCOPIA DE DESINTEGRACIÓN DENTRO DEL PROYECTO EURICA EN RIKEN (JAPÓN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Jan Taprogge)

En 2012 nuestro grupo de investigación realizó un experimento de espectroscopía de desintegración en el RIKEN Nishina Center dentro del Proyecto EURICA. Para dicho experimento se empleó un haz primario de ²³⁸U para producir núcleos muy ricos en neutrones alrededor de la región doblemente mágica del ¹³²Sn. Estos núcleos se implantaron en WAS3ABi, una matriz de detectores de DSSSD, que estaba rodeado por la matriz de detectores de germanio EURICA para observar radiación γ emitida en coincidencia retrasada con la implantación o las desintegraciones β de esos núcleos exóticos. La tesis doctoral de Jan Taprogge se centra en identificar estados isomeros de una vida media del orden de los μs y ms en los isótopos del cadmio ricos en neutrones con masas A = 128-133, además del estudio de las desintegraciones β de esos núcleos.

En 2014 los primeros resultados de este trabajo han sido publicados en dos artículos (J. Taprogge et al., Physical Review Letters 112, 132501 (2014) and Physics Letters B738, 223 (2014)). Además se estudiaron en detalle las propiedades globales así como vidas medias de las desintegraciones β y probabilidades de emisión de neutrones retrasados beta. Para el análisis de las vidas medias se utilizaron diferentes métodos, incluyendo el desarrollo de un nuevo código de análisis para obtener una estimación de máxima verosimilitud en los casos con muy poca estadística. De esa manera la vida media de los estados de desintegraciones β hasta ¹³⁴Cd podrían ser deducidos. Las vidas medias de los núcleos próximos al cierre de capas N = 82 son cruciales como parámetros de entrada para los cálculos del proceso r, debido a que las abundancias finales son especialmente sensibles a esas vidas medias. Además, se estudió la desintegración β de ¹²⁹Cd y por primera vez se ha podido generar un esquema de niveles muy detallado de su núcleo hijo ¹²⁹In. Por otra parte, se pudo deducir la intensidad de la población beta de los estados excitados en ¹²⁹In. La desintegración β del ¹²⁹Cd al ¹²⁹In es de particular interés, ya que la contribución de las primeras desintegraciones prohibidas en la región N < 82 cerca del doblemente mágico ¹³²Sn es todavía una cuestión abierta.

MEDIDA DE MOMENTOS MAGNÉTICOS CON HACES EXÓTICOS, RICOS EN NEUTRONES EN REX-ISOLDE

(FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Andres Illana, Angel Perea)

El núcleo es un sistema cuántico complejo conformado por partículas que interactúan fuertemente entre ellas, mostrando una gran variedad de estructuras y formas que todavía no están plenamente representadas por la teoría. Los momentos magnéticos proporcionan información esencial si deseamos estudiar las propiedades de una sola partícula de la función de ondas nuclear. Dependiendo del estado y de qué tipo de núcleo existen docenas de técnicas que han sido utilizadas durante años. Por ello, con el fin de estudiar los momentos magnéticos de los núcleos radiactivos con estados excitados que están caracterizados por tiempos de vida media del orden de ps, se aplicará la técnica de los campos transitorios (*Transient Field, TF*) en combinación con la excitación Coulombiana en la cinemática inversa. Esta técnica se ha utilizado con éxito durante muchos años para medir momentos magnéticos con haces estables.

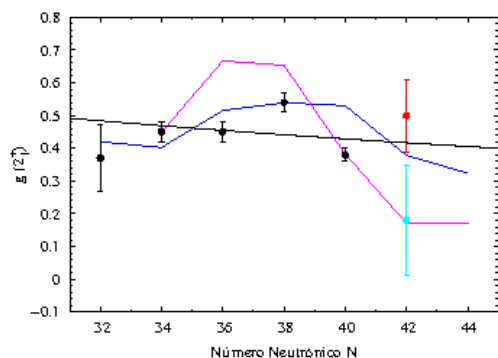


Figura: Comparación entre los valores teóricos y experimentales del factor g para el primer estado excitado 2^+ en los isótopos par-par del Zn. Los círculos negro y azul muestran los valores medidos previamente, y el medido en este experimento en rojo. Las líneas representan diversas aproximaciones teóricas para dicha región.

A finales del 2011, nuestro grupo en colaboración con colegas de otros centros e instituciones Europeas llevó a cabo la primera parte del experimento IS483 en la instalación REX-ISOLDE en el CERN. El objetivo de dicho experimento fue la medida del momento magnético del primer estado excitado 2^+ del ^{72}Zn , ver figura. El experimento fue analizado por A. Illana en el marco de su tesis doctoral. Dicha tesis fue defendida en la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid el 18 de junio de 2014. Además, estos resultados han sido presentados en diversas conferencias y publicados tanto como contribución de conferencia (EPJ Web of Conferences INPC2013 66, 02054 (2014) como en revista (Phys. Rev. C 89 (2014) 054316). Finalmente, un artículo sobre la cámara de reacción diseñada y construida para este experimento ha sido enviado a finales del 2014 a la revista *Nuclear Instruments and Methods A*.

ESPECTROSCOPIA GAMMA EN-HAZ CON EL ESPECTRÓMETRO DALI2 EN RIKEN (JAPÓN)

(Project FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Enrique Náchter)

En abril de 2014 hemos participado en el experimento NP1306-RIBF31R1 en RIKEN dedicado a la medida de la probabilidad de transición al primer estado excitado 2^+ , $B(E2)$, en el núcleo semi-mágico $^{130}\text{Cd}_{82}$. En este experimento, que se ha realizado en el marco de una colaboración internacional liderado por nuestros colegas japoneses, se han empleado la excitación Coulombiana a energías relativistas y el espectrómetro gamma DALI2. Actualmente los datos obtenidos están siendo analizados. Esperamos que los resultados de este experimento completarán nuestro reciente estudio de las propiedades electromagnéticas de los isótopos ricos en neutrones hasta el cierre de capas $N=82$ que hemos realizado a lo largo de los últimos años usando excitación Coulombiana a bajas energías en REX-ISOLDE.

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Probablemente el hidrógeno molecular (H_2) es el candidato actual más claro para sustituir a los combustibles fósiles como vector energético medioambientalmente neutro. El almacenamiento seguro y eficiente de H_2 presenta, sin embargo, una serie de desafíos tecnológicos aún no resueltos. Una de las posibles soluciones es la adsorción del H_2 a bajas temperaturas en materiales nano-estructurados suficientemente ligeros. Sin embargo, las limitaciones prácticas imponen una temperatura mínima de 77 K (la del aire líquido) y unas 50 atmósferas de presión máxima. Esto impone unas condiciones termodinámicas particularmente problemáticas. Por encima de los 33 K el hidrógeno molecular se encuentra en un estado supercrítico lo que implica un fluido que no puede ser condensado. Es decir, mediante interacciones débiles (dispersivas) comparables a las que se dan entre las propias moléculas de tal forma que no se produzca la ruptura de enlace químico de la molécula (fisorción), el estado termodinámico es tal que no se puede conseguir una retención substancial de las moléculas sobre el sustrato adsorbente.

Mediante el uso concurrente de técnicas de dispersión de neutrones y medidas de adsorción en los últimos años hemos podido identificar algunos mecanismos que contribuyen a aumentar sustancialmente la capacidad de almacenamiento de los correspondientes adsorbatos, en particular en nanoestructuras carbonosas.

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 produjo 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).

BIOESPECTROSCOPÍA INFRARROJA Y RAMAN

Dentro del proyecto Innpackto IPT-2012-0769-010000 se ha aplicado la espectroscopía infrarroja y FT-Raman para analizar la composición del plasma sanguíneo y su estructura proteica, correspondiente a 150 pacientes de la enfermedad de Alzheimer (EA) en su desarrollo inicial, y a pacientes con demencia frontotemporal y controles sanos de edad similar a los sujetos con enfermedad neurodegenerativa. Los espectros tratados mediante análisis multivariante permiten una clasificación correcta de las muestras superior al 80%. Asimismo y dentro de un objetivo de este proyecto sobre el desarrollo de un sistema automático utilizando la línea laser de 785 nm para el diagnóstico de la EA en aplicaciones clínicas, las muestras de plasma citadas se han medido también en un espectrómetro Raman dispersivo dotado de esta línea laser, determinando las condiciones óptimas de registro (potencia excitatriz, tiempo de exposición y número de acumulaciones) que permitan obtener entre ambas series de medidas unos coeficientes de variación inferiores al 10% para los parámetros o marcadores espectroscópicos clasificatorios.

ESPECTROSCOPÍA EN PLASMAS DE ABLACIÓN INDUCIDOS POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Hemos estudiado la evolución espacio-temporal del plasma producido por la ablación de monóxido de silicio (SiO) inducida por un láser de CO₂ de alta energía. Las técnicas utilizadas para ellas han sido Espectroscopía de Emisión Óptica (OES), OES resuelta en el tiempo, técnicas de imagen 2D resueltas espacial y temporalmente. El plasma resultante resultó fuertemente ionizado produciendo especies iónicas como Si⁺, O⁺, Si²⁺, O²⁺ and Si³⁺, siendo rico en átomos de silicio y oxígeno neutros y débiles bandas moleculares de SiO. Se registraron las imágenes del plasma resueltas espectralmente y espacialmente (distancia del blanco) mediante 2D OES resuelta en el tiempo. Se caracterizó el comportamiento temporal de líneas de emisión específicas de las especies Si, Si⁺, O⁺, Si²⁺ y O²⁺ resultando en un decaimiento más rápido de las especies O²⁺ y Si²⁺ que las de O⁺, Si⁺ y Si atómico. Se calculó la densidad electrónica del plasma a diferentes tiempos de su expansión mediante el ensanchamiento Stark de algunas líneas aisladas de silicio monoionizado. La temperatura de excitación del plasma se estimó mediante las intensidades relativas de dos líneas del Si²⁺ y la ecuación de Boltzman, variando a diferentes tiempo entre 1 y 3 eV.

Hemos aplicado nuestras técnicas de análisis y excitación a muestras biológicas. El plasma generado mediante LIBS en tejido muscular de cerdo se ha investigado utilizando un láser de CO₂ de alta potencia. El plasma muestra emisiones debidas a especies atómicas neutras Na, K, Ca, Mg, H, N y O, especies ionizadas C⁺, C²⁺, Mg⁺, N⁺ y O⁺ y bands moleculares of CN(B²Σ⁺ – X²Σ⁺), C₂(d³Π_g – a³Π_u), CH(B²Σ⁺ – X²Π; A²Δ – X²Π), NH(A³Π – X³Σ⁺), OH(A²Σ⁺ – X²Σ⁺), and CaOH(B²Σ⁺ – X²Σ⁺; A²Π – X²Σ⁺). Hemos focalizado nuestro trabajo en el estudio de la dinámica del plasma expandiéndose en el aire a presión atmosférica y en vacíos de 0.8 y 0.01 Pa. Con técnicas de imagen 2D resueltas espacial y temporalmente se han podido estudiar las dinámicas de diferentes especies atómicas e ionizadas. Igualmente se han medido y resuelto espacial y temporalmente las densidad electrónica y la temperatura del plasma. Para ciertas especies del silicio y magnesio se han estimado sus velocidades promedio en el plasma.

NANOFABRICACIÓN

Se ha continuado el desarrollo la línea de trabajo consistente en la fabricación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y catalíticas. El principal objetivo de esta

nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que den lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales, dando lugar a la formación de cavidades interpartícula o *nanogaps* altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Durante el año 2014, se han desarrollado diferentes protocolos para la obtención de nanoestrellas de plata, nanopartículas éstas que no habían sido preparadas hasta la fecha, mediante el estudio experimental de la modificación de las características morfológicas en función de las condiciones experimentales aplicadas. El interés de las nanoestrellas de plata se debe a que estas nanopartículas presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados por nosotros evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. Asimismo, se han preparado nanopartículas huecas de oro y plata con forma de nanoestrella. Estas nuevas nanopartículas se espera que presenten interesantes propiedades en la modulación de la resonancia de plasmón, permitiendo encontrar nanopartículas con resonancias situadas en la región del infrarrojo cercano del espectro. Estas propiedades permitirán interesantes aplicaciones de estas nanopartículas en termoterapia y en *drug delivery*. Estas nanopartículas se han caracterizado mediante microscopía TEM y SEM, y microscopía de campo oscuro, espectroscopía SERS y SEF.

Por otra parte, se ha llevado a cabo un estudio del ensamblaje de NPs mediante moléculas bifuncionales los ditioles (tanto alifáticos como aromáticos) y diisocianuros aromáticos con cadena intermedia fenilénica de longitud variable. La caracterización de estos sistemas se ha llevado a cabo mediante resonancia de plasmones, TEM y Espectroscopía SERS y SEF. El efecto de la estructura del ensamblador sobre las dimensiones de la cavidad interpartícula y la actividad SERS de estos sistemas se ha caracterizado en base a las isotermas de adsorción, y el correspondiente estudio de la coordinación y la posibilidad de formación de multicapas de los ensambladores.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas ha continuado siendo una línea importante en nuestro grupo durante 2014. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas.

Se ha progresado en la realización de experimentos de funcionalización empleando ciclodextrinas y cucurbituriles orientados hacia la detección de pesticidas altamente insolubles en agua. Estos sistemas presentan una cavidad hidrofóbica interna dentro de la cual pueden alojarse moléculas difíciles de detectar por SERS.

Asimismo, se ha caracterizado la funcionalización de NPs mediante el ensamblaje de NPs inducido por ditioles alifáticos y aromáticos. Estas moléculas bifuncionales desempeñan una doble función: a) el acoplamiento de nanopartículas con la formación de espacios interpartícula de gran intensificación de campo, y b) la creación de cavidades intermoleculares que permiten el ensamblaje de analitos. La detección de analitos es entonces posible pues éstos se concentran en las cavidades interpartícula donde la intensificación del campo es máxima. En este sentido, se han empleado ditioles alifáticos con diferente longitud de cadena para ensamblaje de nanopartículas de plata y de oro aplicados en la detección de los pesticidas organoclorados endosulfán, aldrina, dieldrina y lindano. Para ello se ha llevado a cabo una optimización de los sistemas para las diferentes condiciones experimentales (recubrimiento de la superficie por el ensamblador, longitud de onda de excitación, sustrato metálico), determinándose la sensibilidad y especificidad de estas detecciones tras análisis de las isotermas de adsorción. Estos trabajos se han realizado en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad P.J. Safarik de Kosice (Eslovaquia).

Asimismo, se ha llevado a cabo la funcionalización de NPs con diisocianuros y moléculas relacionadas, con el fin de aplicar estos sistemas en procesos catalíticos de interés industrial y también para detección de analitos. Esta línea se está desarrollando en colaboración con investigadores de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón). Estas moléculas se han empleado en la caracterización de la actividad SERS de superficies de Ag obtenidas por deposición mediante láser pulsado (PLD) cedidas por investigadores del Instituto de Óptica. Este último estudio ha implicado el estudio previo de la coordinación de grupos diisocianuro sobre plata y oro para conocer los procesos plasmónicos que tiene lugar sobre la superficie.

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

Durante el año 2014 se ha llevado a cabo la aplicación de la técnica SERS para el análisis directo de sustancias contaminantes que no necesitan funcionalización debido a la adsorción directa con la superficie metálica. En colaboración con investigadores de la Universidad Estadual Paulista de Presidente Prudente en Brasil y la Universidad de Málaga (con los que se mantiene una colaboración como Unidad Asociada del CSIC), se ha realizado un estudio de la detección del pesticida canbendazim. Este estudio ha consistido en una investigación de la adsorción sobre superficies metálicas, mediante espectroscopía Raman, IR y resonancia de plasmón, asistida por un análisis de modos vibracionales normales por DFT de los complejos metálicos.

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Durante el año 2014 se ha proseguido con la investigación de la interacción de moléculas biológicas con nanopartículas metálicas de Ag y Au. Este estudio persigue también la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular. Gran parte de estas investigaciones se han realizado gracias al proyecto i-LINK del CSIC en colaboración con investigadores de la Universidad de Paris XIII (Francia). Para ello se ha analizado la adsorción de los péptidos terapéuticos somatostatina, octreotido y lanreotido sobre superficies de plata y de oro. En estos péptidos se ha investigado en profundidad el efecto de la adsorción sobre metales sobre el enlace disulfuro.

Se ha terminado el estudio de la adsorción de proteínas (albúmina humana y bovina, así como la mioglobina, importante proteína relacionada con el transporte y almacenamiento de oxígeno en músculo) sobre metales, iniciado en años anteriores. Para llevar a cabo esta investigación se han empleado diferentes técnicas espectroscópicas: Raman, SERS, Fluorescencia, dicroísmo circular, UV-visible, así como diferentes técnicas de microscopía. Este trabajo se ha realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Florencia (Italia).

Se ha continuado con el análisis estructural de materiales biológicos altamente luminiscentes de origen natural. En este terreno se ha realizado un estudio estructural y dinámico de sustancias polifenólicas procedentes de las sustancias húmicas y melaninas resultantes de procesos de digestión inducidos por hongos. En particular, se ha avanzado en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. La funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad ha permitido aumentar el rendimiento de los sistemas plasmónicos en la detección de sustancias de alta complejidad estructural, debido a la carga negativa existente en estos compuestos naturales. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia) y con investigadores del IRNAS-CSIC en Sevilla.

En colaboración con el Departamento de Biofísica de la Universidad P.J. Safarik de Kosice en Eslovaquia, se ha comenzado durante el 2014 el estudio de los líquenes de la especie *Xanthoria parietina* mediante la espectroscopía SERS. Para ello se han obtenido mapas Raman sobre la distribución de pigmentos en esta especie de líquenes.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS

Durante este año se ha continuado con el estudio de la formación de complejos de diferentes fármacos con supramoléculas transportadoras, los cucurbituriles. Por otro lado, también se ha progresado en el estudio de nuevos sistemas transportadores de fármacos complejos, de tamaño micrométrico, basados en la inclusión de nanopartículas de plata con el medicamento en los nanoporos de un polímero sintético biodegradable y biocompatible, el PBS. El estudio se ha llevado a cabo en estructuras porosas de diferente tamaño. Las técnicas usadas para la caracterización en ambos casos han sido espectroscopias de fluorescencia y Raman y amplificadas, SEF y SERS.

Los fármacos utilizados en el estudio han sido los anti-inflamatorios no esteroideos ketorolaco, indometacina y piroxicam y el antitumoral emodina, con los que ya se tiene experiencia en el laboratorio.

En el caso de los cucurbituriles se han obtenido, en los casos en que ha sido posible, la estequiometría del complejo, el pH de formación, las constantes de unión y la especie molecular de fármaco incluido. Para los sistemas de inclusión del medicamento en polímero nanoporoso se han establecido las condiciones de fabricación de los nanoporos que dan una óptima infiltración e inmovilización del fármaco.

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

En el año 2014 se ha completado el trabajo sobre el análisis SERS del colorante malva con el estudio de la interacción de los diferentes componentes de dicho colorante con las nanopartículas de plata empleadas como soportes SERS. Para ello, se han optimizado las diversas estructuras con el programa Gaussian y se han calculado los espectros Raman correspondientes. El análisis de los modos normales de vibración se ha empleado para determinar la orientación de moléculas sobre la superficie metálica.

Se ha desarrollado un nuevo método de preparación de nanopartículas de plata por irradiación láser a 442 nm sobre fibras de lana. El empleo de este tipo de sustratos metálicos es muy interesante para el análisis de pigmentos y tintes de interés artístico, puesto que se pueden preparar directamente en un punto específico del material (fibras, en este caso), además de no dejar ninguna marca en el mismo. La irradiación a 442 nm da lugar a nanopartículas más versátiles que irradiando a 532 nm. En el primer caso se pueden obtener espectros SERS a varias longitudes de onda (442, 532 y 785 nm), mientras que en el segundo, solo se pueden llevar a cabo análisis SERS a 532 nm. Se han estudiado las condiciones experimentales óptimas, tales como potencia del láser, tiempo de irradiación y concentración de nitrato de plata. Las nanopartículas preparadas se han empleado para analizar colorantes sintéticos sobre fibras patrón de lana teñidas y sobre muestras reales. Se ha estudiado tintes de diferentes grupos, tales como triarilmetanos, xantenos y monoazo. Este trabajo se ha realizado en colaboración con la Universidad de Boloña, durante las estancias en nuestro departamento de varias estudiantes de máster y doctorado.

En colaboración con el grupo de Láseres, Nanoestructuras y Procesado de Materiales del Instituto de Química-Física Rocasolano se ha estudiado la eliminación con láser de ultravioleta de diversos barnices sobre sustratos pictóricos. En particular, se emplearon las técnicas de microscopía óptica y Raman para estudiar las modificaciones físicas y químicas de las muestras tras la irradiación a diversas longitudes de onda (213 y 266 nm). Los barnices empleados eran resinas terpénicas, tales como trementina, copal, damar, colofonia, sandárac y almáciga. Dichos barnices se estudiaron tanto en disolvente como en aceite. De este modo, se ha llevado a cabo el análisis de muestras naturales, y envejecidas de forma natural y artificial. Mediante la técnica de espectroscopía Raman se ha estudiado la degradación foto-oxidativa de los barnices originada por la irradiación láser de alta energía y la consiguiente elevación de la temperatura.

Se ha continuado con la aplicación de la espectroscopía Raman y la técnica SERS en el estudio de pigmentos contenidos en manuscritos islámicos antiguos procedentes de Marruecos. El empleo de nanopartículas de Ag aplicadas sobre determinadas zonas coloreadas de los manuscritos estudiados y el uso del Raman confocal, que permite un aumento de la resolución espacial de las medidas, ha puesto de manifiesto la presencia de pigmentos de naturaleza antraquinónica en dichos manuscritos, incluso en tintas de color negro. Se está aplicando la técnica SERS en la detección de posibles pigmentos de naturaleza orgánica en tintas de coloración amarilla, negra y verde. Este trabajo se ha realizado gracias a la colaboración con investigadores de la Universidad Moulay Ismail de Meknes en Marruecos.

Se ha continuado con la caracterización de aditivos tradicionales y compuestos orgánicos comerciales utilizados en el patrimonio Histórico Artístico. Algunos de ellos, sobre todo los aditivos comerciales, y aunque se añaden a la pasta en pequeñas concentraciones, presentan una elevada fluorescencia, siendo la técnica SERS muy adecuada para su identificación.

En cooperación con el Instituto de Geociencias (CSIC), se ha estudiado la posibilidad de identificar tratamientos superficiales (copolímeros de TEOS y etilmetacrilato) antes y después de aplicarlos en piedras calizas, mediante técnicas portátiles como el Raman.

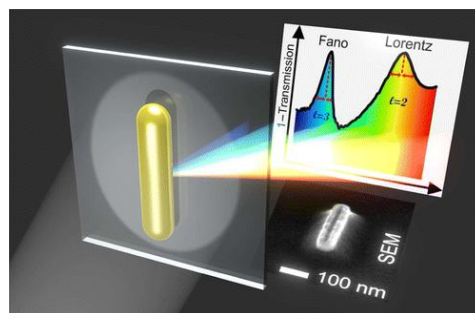
Finalmente, se ha realizado un trabajo en colaboración con el grupo de Espectroscopía de Ablación Láser y Fotodisociación, de obtención de vidrios sintéticos mediante LIBS de láser pulsado y continuo sobre materiales artificiales de construcción. Este tratamiento da lugar a cambios microestructurales importantes en la muestra generando vidrios, así como la liberación de Ca y vapor de agua que reaccionan dando lugar a la formación de hidróxido cálcico.

FOTODETECCIÓN CON NANOHILOS SEMICONDUCTORES

Se ha investigado teórica y experimentalmente la absorción de luz en nanohilos (*nanowires* en inglés) semiconductores. Entender la absorción de luz en nanoestructuras es crucial para optimizar la interacción luz-materia en la nanoescala. Los nanohilos semiconductores han atraído un enorme interés como elementos para diseñar nuevos fotodetectores y dispositivos fotovoltaicos más eficientes. Estos nanohilos, debido a sus pequeñas dimensiones comparables a las longitudes de onda ópticas, son muy eficientes para concentrar la luz e intensificar su absorción, por lo que se pueden utilizar también como nanoantenas captadoras de luz. Las medidas muestran una transición en el mecanismo de dicha absorción dependiendo de que el ángulo de incidencia de la luz sea perpendicular o rasante al eje del nanohilo, de acuerdo con los cálculos teóricos y las simulaciones numéricas realizadas. Esto se ha realizado en colaboración con el grupo del Dr. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) y Philips Research Labs (Eindhoven).

NANOVARILLAS METÁLICAS COMO NANOANTENAS Y NANOCALENTADORES ÓPTICOS

En este trabajo teórico y experimental realizado en colaboración con investigadores del IMEC y de la Universidad Católica de Lovaina (Bélgica), se estudia la respuesta óptica espectral de nanovarillas (o *nanorods* en inglés), uno de los sistemas más utilizados en el estudio de las interacciones entre luz y materia a escala nanométrica. Estas estructuras metálicas tienen tamaños típicamente menores que la longitud de la onda electromagnética incidente; además, su longitud es mucho mayor que su anchura. En



la mayoría de los casos, las nanovarillas se diseñan de forma tal que a la longitud de onda de interés actúan en su modo fundamental (el de más baja energía), también llamado resonancia plasmónica de media onda o dipolar. Sin embargo, este trabajo ha permitido obtener información valiosa acerca de cómo estas nanovarillas operan en modos de orden superior, poniendo de manifiesto la existencia de fenómenos de interferencia entre los distintos modos, aspecto muy interesante desde el punto de vista básico (resonancias Fano) o aplicado (sensores). Por otro lado, se han estudiado también este tipo de nanovarillas metálicas para procesos fototérmicos. La absorción en el metal en la resonancia dipolar induce un calentamiento en el entorno que puede ser útil en terapias fototérmicas, sintonizando convenientemente el tamaño de las nanovarillas para operar en las ventanas biológicas; se ha investigado esa eficiencia de calentamiento teórica y experimentalmente en colaboración con investigadores de la UAM y de la URJC.

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

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.
- Transferencia de energía rotacional por colisiones moleculares inelásticas.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico
- Transferencia de energía por colisiones moleculares.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.
- Estudio y caracterización espectroscópica de filosilicatos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL.
- 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 y estimulada
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.

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

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS, SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en los cinco apartados detallados 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 y de otros sistemas astronómicos. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Mediante una cámara de alto vacío y un criostato refrigerado por He en circuito cerrado podemos alcanzar 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 2014.

La posible presencia de moléculas relacionadas con procesos biológicos en muestras astrofísicas es la base para el estudio en el laboratorio de especies y sistemas afines. El auge de la ciencia o especialidad conocida como astrobiología en los últimos años nos ha motivado para enfocar parte de nuestras investigaciones a este campo. En concreto, en el 2014 hemos finalizado un proyecto sobre el ión carbamato, NH_2COO^- , que puede formarse a partir de CO_2 y NH_3 , tanto en presencia de H_2O como en su ausencia, en las condiciones presentes en multitud de sistemas astrofísicos. Nuestros estudios se han centrado en las reacciones entre los precursores depositados a 15 K, y tras calentamiento controlado, a través de los productos de reacción formados en estos procesos. Los resultados se han apoyado en cálculos teóricos utilizando CASTEP y Gaussian. Es especialmente relevante la conclusión que predice la imposibilidad de detectar el ion amonio, NH_4^+ , en ciertas condiciones, mientras que el NH_2COO^- sí podría ser observable.

Dentro de este mismo campo, hemos iniciado una nueva línea que nos abre un amplio campo de posibilidades. En ella combinamos varias de nuestras técnicas experimentales. Mediante la técnica llamada “plasma enhanced chemical vapor deposition” (PECVD), hemos generado en nuestro reactor de descargas, depósitos carbonáceos que sirven como modelos para las partículas carbonáceas presentes en muestras astrofísicas. Estos depósitos son interesantes *per se*, pero también como sustratos de adsorción para todo tipo de moléculas, y a su vez, pueden ser irradiados por fuentes externas como radiación UV o de rayos X, electrones, protones, etc. En un primer trabajo, hemos presentado un estudio de la estabilidad de muestras de partículas carbonáceas y glicina bajo bombardeo de electrones e irradiación de UV.

Como continuación a un trabajo previo de nuestro grupo, en el que se observaba la aparición en el espectro de IR de la banda de vibración ν_1 del CH_4 , prohibida por las reglas de selección de espectroscopía, hemos realizado una serie de cálculos tratando de averiguar el origen de la activación de esta vibración. Se ha concluido que puede deberse a una interacción con vibraciones de moléculas de H_2O presentes en el medio en fase amorfa, y que podrían aparecer a una frecuencia mucho menor de la observada para el hielo cristalino.

En colaboración con el grupo de Guillermo Muñoz Caro, en el CAB, se han determinado experimentalmente las secciones eficaces vibracionales de H_2O , CO_2 , CH_3OH y NH_3 en la zona de IR lejano. Nuestra principal aportación a este trabajo ha sido de tipo teórico, mediante la creación de modelos cristalinos y amorfos de estas especies, y la predicción de sus espectros.

En la parte atmosférica, se ha establecido una colaboración con la Dra. María Teresa Baeza Romero, de la Universidad de Castilla La Mancha, con la que hemos obtenido financiación del Ministerio de Economía y Competitividad, para el estudio de la formación y reactividad de aerosoles de yodo, desde un punto de vista teórico y experimental. En este 2014, hemos comenzado con el montaje del laboratorio en el campus de Toledo, así como estudios teóricos exploratorios de las reacciones de los óxidos de yodo con NO_x . Esperamos para el 2015 tener gran parte de los resultados de este proyecto.

Además se ha comenzado a estudiar en las zonas del infrarrojo medio y lejano el aerosol atmosférico descrito como polvo mineral, el cual está compuesto básicamente por filosilicatos tales como esmectitas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio y yeso. Así mismo en colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT se ha finalizado la caracterización experimental y teórica de Palygorskita de Serradilla (Cáceres).

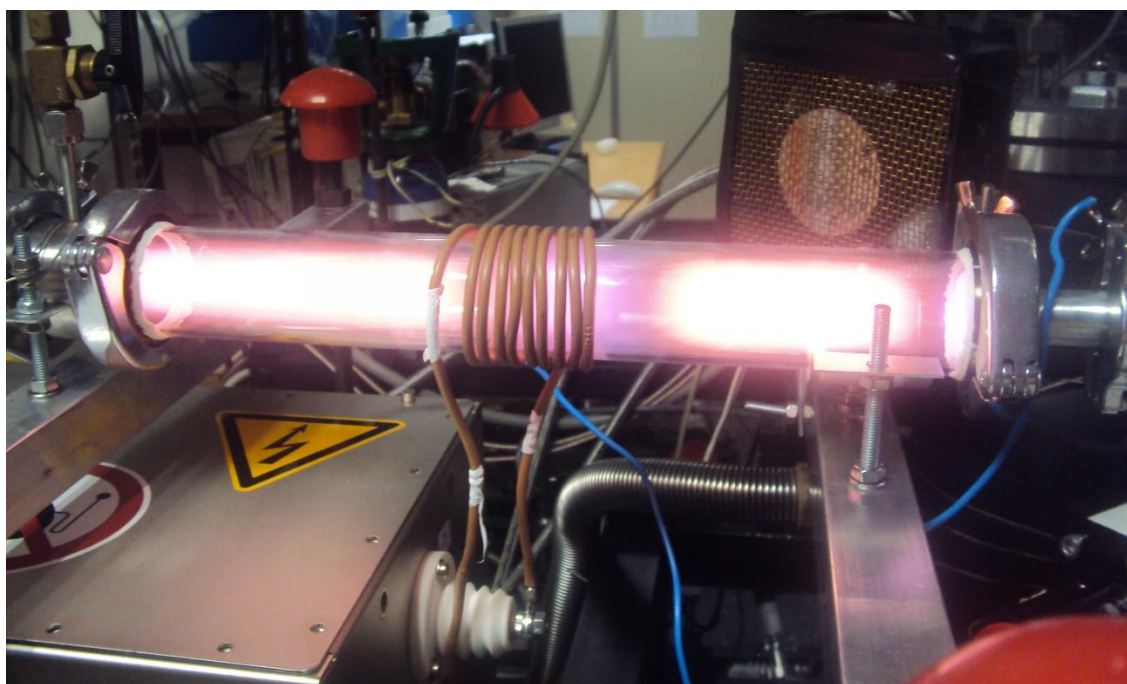
En esta parte atmosférica se engloba también un trabajo realizado en colaboración con investigadoras de las Universidades de Isparta y Karabuk (Turquía), y con Pedro Gómez Calzada, de la U. Complutense, acerca de propiedades de enlace de agregados formados por HNO_3 , HOCl y H_2O , moléculas presentes en distinta concentración en la atmósfera terrestre, y que pueden participar en procesos químicos de interés atmosférico.

Los principales resultados de estas líneas están reflejados en las publicaciones correspondientes, reseñadas más adelante en esta Memoria.

Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasmas-superficies

Continuando la línea de investigación sobre cinética de plasmas fríos en distintas mezclas de gases precursores ricos en hidrógeno, hemos completado un estudio experimental y teórico sobre plasmas de $\text{H}_2 + \text{Ar}$ a distintas presiones y proporciones de mezcla que nos ha permitido definir la decisiva influencia que la temperatura electrónica y ciertos coeficientes cinéticos de reacción ejercen sobre la distribución de concentraciones de los distintos iones generados en estas descargas, en particular, los iones mayoritarios: Ar^+ , ArH^+ y H_3^+ , entre los cuales, cabe destacar el interés del ArH^+ por su reciente descubrimiento en el espacio, siendo el único compuesto químico de gas noble encontrado ahí hasta ahora.

En la misma línea, hemos abordado el estudio de plasmas de $\text{H}_2 + \text{O}_2$ en distintas proporciones de mezcla mediante su generación y caracterización en el laboratorio y mediante la elaboración de un modelo cinético que permite investigar los procesos responsables de la generación en superficie de H_2O como producto estable, y las reacciones en fase gas que conducen a la aparición de iones protonados mayoritarios como H_3^+ y H_3O^+ . Como novedad a resaltar en el modelo, frente a otros desarrollados anteriormente por nosotros para simular descargas de otros precursores, cabe destacar la incorporación de iones negativos.



Laboratorio de Plasmas Fríos. Plasma de aire a baja presión generado en una descarga de radiofrecuencia.

Hemos realizado estudios dedicados a la formación de películas carbonadas de interés astrofísico mediante plasmas generados en descargas de radiofrecuencia con mezclas de He y CH_4 , y a su caracterización y posterior procesado. En colaboración con el Laboratorio de Hielos de nuestro departamento, se ha analizado la naturaleza de las películas depositadas sobre muestras de silicio mediante espectroscopía IR por Transformada de Fourier (FTIR), y posteriormente las muestras se han irradiado con haces de electrones de 2 keV y con luz UV a fin de investigar posibles cambios estructurales.

Los principales resultados de estas líneas de investigación quedan reflejados en las correspondientes publicaciones y contribuciones a congresos, indicadas más adelante en esta Memoria.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Hemos continuado nuestros estudios sobre el efecto túnel y la adiabaticidad vibracional en la dinámica de reacciones elementales usando variantes del sistema MuHH como banco de pruebas. En este caso hemos considerado los dos canales del sistema asimétrico D+MuH. Los resultados de nuestros cálculos muestran que el canal de intercambio de Mu (que conduce a DMu+H) presenta un carácter mucho más cuántico, con probabilidades de reacción más estructuradas y un efecto túnel más marcado, que el canal de “abstracción” que lleva a la formación de HD. La asimetría del sistema induce también un efecto selectivo de la excitación rotacional del MuH, que favorece la producción de DMu frente a HD.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular.

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y la orientación de una molécula aislada mediante combinación de pulsos láser y campos estáticos. Se ha extendido la técnica de evolución adiabática del Hamiltoniano de Floquet al desarrollo de un método muy general para controlar la excitación o desexcitación rotacional y simultáneamente alinear coherentemente moléculas en estados iniciales excitados en J con M arbitrario.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Hemos continuado el estudio del control del alineamiento y orientación de moléculas dipolares en interacción en una red óptica en régimen de tight binding. Hemos optimizado el control preciso del entrelazamiento entre las moléculas mediante la combinación de tres técnicas: control de orientación en cada nodo mediante la intensidad del campo láser local, ruptura controlada la simetría espacial de la red aplicando patrones de intensidad diferente en nodos contiguos y, por último, variación adiabática del eje de polarización del campo láser respecto al eje de la red óptica para inducir cruces controlados en las cuasienergías.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Se ha continuado con el estudio cuantitativo de flujos fuera del equilibrio, en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una especie de tierra de nadie donde escasean los datos experimentales, los modelos teóricos suficientemente rigurosos, y los métodos de cálculo eficientes. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es viable el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Por otra parte, desde el punto de vista experimental, los chorros de líquidos subenfriados son un medio ideal para estudiar la solidificación homogénea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas.

En la actualidad el Laboratorio de Fluidodinámica Molecular dispone de dos instalaciones de diagnóstico de chorros mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinte años. Una (A) está adaptada a la producción de chorros de gases y líquidos desde toberas criogénicas, y la otra (B), a la producción de chorros gaseosos de sustancias líquidas desde toberas calientes.

En la instalación (B) se han refinado las medidas de los espectros Raman de chorros de $\text{H}_2\text{O}(\text{g})\text{:He}$ para tener en cuenta la anisotropía del campo de flujo, que introduce errores importantes en puntos cercanos a la tobera. Por otra parte, a diferencia de otros sistemas como O_2 o N_2 estudiados previamente por nuestro grupo, en el caso del H_2O se observa claramente que la población de los niveles rotacionales más energéticos se aparta progresivamente de la distribución Boltzmann, lo que impide definir una “temperatura” rotacional, y obliga a trabajar con las poblaciones rotacionales individuales en el análisis de la dinámica colisional. Para su interpretación se han empleado tres conjuntos de coeficientes de transferencia nivel-a-nivel $\text{H}_2\text{O}\text{:He}$ calculados por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones del Instituto de Física Fundamental del CSIC, con el que se colabora estrechamente. Finalmente, se han obtenido unos coeficientes promediados y escalados al experimento, que reproducen los experimentos dentro del 15% entre 20 y 120 K.

En cuanto a las colisiones $\text{H}_2\text{O}\text{:H}_2$ y $\text{H}_2\text{O}\text{:D}_2$, de gran interés astrofísico, en los experimentos del año anterior con chorros de mezclas de *para*- H_2 , *normal*- H_2 , *orto*- D_2 y *normal*- D_2 con H_2O (gas) no se han podido determinar con precisión las temperaturas traslacionales, debido a las propiedades fluidodinámicas anómalas (viscosidad volumétrica) del H_2 . Por ello se han realizado nuevas medidas mediante espectroscopía Raman en chorros supersónicos de hidrógeno puro con mayores números de Reynolds, en los que se ha puesto a punto un método para obtener la temperatura traslacional, que se espera poder trasladar a las mezclas diluidas con $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$.

Se ha continuado con el análisis de las colisiones $\text{O}_2\text{:He}$ en chorros supersónicos a partir de la evolución temporal de las poblaciones rotacionales de O_2 , obtenidas mediante espectroscopía Raman. Para la interpretación de los experimentos se han utilizado las tasas de transferencia por colisiones inelásticas $\text{O}_2\text{:O}_2$ obtenidas en 2011 en nuestro laboratorio,

junto con las $O_2:He$ calculadas por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones del Instituto de Física Fundamental del CSIC. Este análisis ha permitido confirmar que, para temperaturas mayores que 10 K, se puede ignorar la estructura fina debida al espín electrónico del O_2 , lo que simplifica enormemente la cinética colisional.

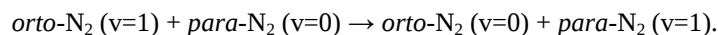
Por otra parte, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania), se han realizado experimentos de espectros Raman de microchorros líquidos (filamentos) de agua. Los microchorros de agua (a diferencia del hidrógeno líquido observado anteriormente en nuestro laboratorio) se rompen en un tren de gotas de unas pocas micras de diámetro, que se enfrían en vacío por evaporación superficial, obteniéndose líquido altamente subenfriado por debajo del punto de fusión, hasta que finalmente solidifican. Se intentará de este modo obtener agua líquida enfriada por debajo de la temperatura de nucleación homogénea ($T_H \approx -38$ C), lo que se conoce como “tierra de nadie”.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

Transferencia de energía por colisiones moleculares.

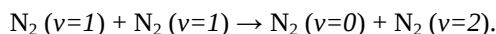
La labor realizada a lo largo de 2014 se ha centrado fundamentalmente en estudios espectroscópicos de alta resolución de la molécula de nitrógeno ($^{14}N_2$), orientados tanto a la determinación precisa de las frecuencias de algunas de sus bandas calientes, que no habían sido observadas hasta ahora por espectroscopía de alta resolución, como al estudio de su dinámica de relajación colisional V-V (transferencia de energía vibracional intermolecular), en una continuación del trabajo iniciado en 2013 y que durante 2014 se ha extendido a un intervalo de temperaturas mucho más amplio.

En la línea principal de trabajo, los estudios de dinámica colisional, se ha usado la técnica de doble resonancia Raman-Raman para, en un experimento de tipo bombeo-prueba secuencial, promover población al estado vibracional excitado $v=1$ de la molécula de $^{14}N_2$ y a continuación, mediante el uso de un retardo variable bombeo-prueba, muestrear la evolución en el tiempo de la población bombeada y la relajación vibracional que experimenta como consecuencia de las colisiones moleculares. El experimento hace uso de la existencia de dos variedades de spin en el N_2 , *orto* y *para*: se sintoniza la frecuencia del sistema de bombeo para promover selectivamente a $v=1$ población perteneciente a una única variedad de spin (hemos elegido la *orto*) y a continuación se monitoriza su evolución y la aparición de población *para* en ese mismo estado $v=1$. Dado que la interconversión entre las dos variedades está, a efectos prácticos, prohibida en la escala de tiempos en que se realiza el experimento, la población *para* que aparece en $v=1$ sólo puede provenir del intercambio de energía colisional descrito por



La medida de la evolución temporal de las poblaciones relativas de ambas variedades de spin nuclear permite determinar la tasa de transferencia colisional intermolecular de energía vibracional V-V. Las medidas se realizaron a temperaturas de 136 K, 226 K y 300 K con objeto de completar las ya iniciadas en 2013, que se habían realizado a 77 K. Esto ha permitido obtener una visión detallada de cómo varía la eficacia de la transferencia de energía V-V por colisiones en función de la energía cinética promedio de las moléculas colisionantes.

La segunda línea de trabajo, en la misma molécula de $^{14}N_2$, se ha nutrido de parte del trabajo experimental realizado para la primera: como consecuencia del bombeo de población a $v=1$ y los procesos colisionales subsiguientes, un pequeño porcentaje de la población experimenta colisiones del tipo



Este tipo de colisión, que se da para las dos variedades de spin, se traduce en que una pequeña fracción de la población total acaba residiendo en el estado excitado $v=2$. Con el mismo esquema experimental ya descrito, y fijando el retardo bombeo-prueba a un valor suficientemente largo como para que esta población sea detectable, se han realizado medidas espectroscópicas de la segunda banda caliente ($v=3 \leftarrow v=2$) del N_2 , que hasta ahora no se había observado de forma directa con una técnica Raman de alta resolución. Esto nos permitirá refinar ligeramente los valores conocidos de las constantes rotacionales de una molécula tan relevante en la naturaleza como es el $^{14}N_2$.

Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.

Se han estudiado los efectos colisionales en el perfil de las líneas de vibración-rotación de la molécula de HCl perturbada por Ar. En colaboración con H. Tran (Laboratoire Interuniversitaire de Systemes atmospheriques, Cretail) se han realizado por primera vez, cálculos de dinámica molecular clásica (CMDs) en este sistema. A partir de potenciales moleculares fiables, estos cálculos proporcionan la evolución temporal de la función de correlación del momento dipolar, y la transformada de Laplace de ésta proporciona el espectro de absorción. Para verificar la validez de los cálculos hemos registrado espectros de líneas aisladas de vibración-rotación de HCl en mezclas con Ar, an un amplio rango de niveles rotacionales y presiones con el espectrómetro de diferencia de frecuencias con una resolución instrumental superior a 10^{-4} cm^{-1} . La comparación entre los espectros medidos y calculados muestra que las CMDs son

capaces de predecir satisfactoriamente el importante efecto de estrechamiento de Dicke en HCl en un amplio intervalo de presiones y números cuánticos.

Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico.

En colaboración con miembros del grupo de Hielos y plasmas fríos del Departamento, y del grupo de Astrofísica del CAB-CSIC, se ha concluido el análisis del espectro vibro-rotacional de $^{36}\text{ArH}^+$ y $^{38}\text{ArH}^+$ producidos en una descarga eléctrica en cátodo hueco acoplada al espectrómetro infrarrojo por diferencia de frecuencias. Cabe destacar que la abundancia natural de ^{36}Ar y ^{38}Ar en la Tierra es de sólo 0.3% y 0.06%. En el espacio, sin embargo, el isótopo más abundante es ^{36}Ar , y recientemente se han identificado $^{36}\text{ArH}^+$ y $^{38}\text{ArH}^+$ en regiones pobres en hidrógeno en diversos objetos galácticos, a partir de datos del satélite Herschel. Dado que la misión Herschel ya ha concluido, y la alta opacidad de la atmósfera a las frecuencias a las que la rotación de esta molécula se puede detectar desde tierra, los estudios futuros de ArH^+ en el espacio dependerán de observaciones en el infrarrojo, que se verán facilitadas por nuestros datos de laboratorio. Previamente a nuestro estudio sólo se habían medido 6 y 2 líneas de $^{36}\text{ArH}^+$ y $^{38}\text{ArH}^+$ respectivamente. Nuestro trabajo aporta 19 nuevas frecuencias medidas con mucha mayor precisión, y ha posibilitado la mejora considerable del ajuste tipo Dunham de las transiciones de todos los isotopólogos de ArH^+ .

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- 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.
- Biofísica.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- Nanocompuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Conformación de materia blanda biológica: Proteínas de membrana en disolución.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígid.
- Fenómenos de precristalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Microscopía electrónica tridimensional: Estudio estructural de macromoléculas biológicas.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Nanoindentación.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización (CRYSTAF-TREF).
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

POLÍMEROS PARA APLICACIONES BIOMÉDICAS: MEMBRANAS ELECTROHILADAS DE ÁCIDO POLILÁCTICO Y NANOPARTÍCULAS DE PLATA COLOIDAL

Este trabajo de investigación se enmarca dentro de la colaboración establecida a lo largo de estos últimos años con el Dr. Ángel Romo-Urbe, de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). En esta ocasión, el proyecto estaba centrado en el desarrollo de polímeros para aplicaciones biomédicas. Usando el método de electrohilado, se prepararon membranas de ácido poliláctico (PLA) y PLA con nanopartículas de plata coloidal (AgNPs), utilizando distintas condiciones de procesamiento. El objetivo del trabajo era diseñar materiales poliméricos para aplicaciones biomédicas. Hay que tener en cuenta que la plata coloidal posee actividad antibacteriana. Las membranas que se prepararon estaban constituidas por una red de fibras de diámetros en el rango de las micras y cuya estructura era predominantemente amorfa. Se encontró que la morfología de las membranas de PLA puede modificarse, en cuanto a la densidad de los aglomerados de material y el diámetro de fibra promedio, variando las condiciones de electrohilado. Asimismo, se observó que la morfología de las membranas se ve afectada por la incorporación de AgNPs. Finalmente, se pudo constatar que las membranas de PLA y PLA/AgNPs poseen un comportamiento hidrofóbico en comparación con las películas de PLA obtenidas mediante disolución. Los resultados sugieren que una adecuada selección de las condiciones de electrohilado permite ajustar la hidrofobicidad de las membranas de PLA/AgNPs. Si a esto se le añade el carácter bactericida de la plata, estas membranas son idóneas para su aplicación en el área de la biomedicina.

ESTUDIOS DE DUREZA EN COMPUESTOS DE RESINAS EPOXI Y ELASTÓMERO

En colaboración con el Dr. Ángel Romo-Urbe (UNAM), se investigó la cinética de curado de un sistema epoxídico, diglicidil éter de bisfenol A (DGEBA) modificado con dos tipos distintos de elastómeros, mediante reometría de cizalla. Los líquidos elastoméricos se eligieron en base a la posible buena compatibilidad química o física con el sistema epoxídico, de manera que se inhibiera la separación de fases, o en su defecto, se minimizara el tamaño de los microdominios. Uno de los elastómeros es poli(dimetil siloxano) con terminación en éter de diglicidílico (PDMS-DGE), y el otro es un copolímero de poli(metil siloxano-co-fenil siloxano) con terminación en dihidróxido (PDMS-co-DPS-OH). El objetivo del trabajo era conseguir un material epoxídico con mayor ductilidad y más fácil procesamiento. Se observó que ambos elastómeros aceleraban la cinética de curado, especialmente en el caso del elastómero con terminación dihidróxido. El análisis de imágenes obtenidas mediante microscopía electrónica mostraron que sólo en el caso de DGEBA/ PDMS-co-DPS-OH curado a 110 °C se inhibe la separación de fases. Estudios de ángulo de contacto pusieron de manifiesto que el elastómero terminado en éter confiere a la resina un carácter más hidrofílico, mientras que aquél terminado en hidróxido aumenta la hidrofobicidad del epóxido. Medidas de indentación mostraron que la adición de líquidos elastoméricos en la preparación de la resina reduce su dureza, H , siendo el sistema DGEBA/ PDMS-DGE el que presenta un menor valor de esta propiedad mecánica. Finalmente, y con objeto de controlar y diseñar las propiedades de estos materiales, se estableció una correlación entre el valor de H , el tamaño de los microdominios y la temperatura de curado.

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

NANOESTRUCTURACION DE MATERIA CONDENSADA BLANDA CON MORFOLOGIAS CONTROLADAS

Nanorejillas poliméricas

Hemos continuado explotando las posibilidades de utilización de rayos láser con el fin de nanoestructurar la superficie de películas delgadas de polímeros. En cooperación con el grupo de las Dras. M. Castillejo y E. Rebollar (IQFR-CSIC) hemos tenido éxito en la nanofabricación inducida por láser de nanosegundos y con distintas polarizaciones de estructuras superficiales periódicas (LIPSS) en una serie de películas delgadas de poli(tereftalato de etileno) que han demostrado ser de utilidad para el crecimiento controlado de células madre mesenquimales. Se ha observado que una mayor proliferación de células ocurre en los sustratos con mayor modificación superficial, en particular para las estructuras preparadas con polarización circular.

Nanoestructuración de polímeros por Litografía de Interferencia de rayos láser

En colaboración con el Dr. Jan Siegel, del Instituto de Óptica (IO-CSIC) hemos explotado el fenómeno de interferencia de dos y tres rayos láser para la nanoestructuración de superficies poliméricas. Mediante este procedimiento se han preparado micro y nanorejillas así como una red hexagonal de nanocavidades. Este estudio demuestra la posibilidad de utilizar la interferencia de un único pulso de nanosegundos de cada rayo láser para la nanofabricación de estructuras poliméricas.

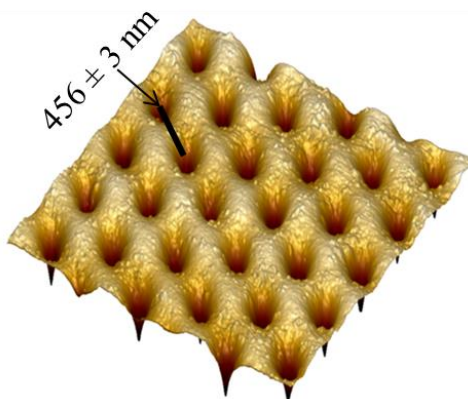


Fig.X. Red hexagonal de nanocavidades en una superficie de Poli(tereftalato de propileno) preparada por la interferencia de un pulso único de tres láseres.

Nanohilos poliméricos

En colaboración con el grupo de Materiales Termoeléctricos del Instituto de Microelectrónica de Madrid, se ha continuado con la investigación sobre la estructura de poli (3-hexiltiofeno) (P3HT) sometido a confinamiento 2D en la nanoescala. Se prepararon nanohilos de P3HT con relaciones de aspecto (longitud-diámetro) por encima de 1000 y diámetros que oscilan entre 15 nm y 350 nm mediante membranas porosas formadas por los poros de plantillas óxido de aluminio anodizado a través de dos métodos de procesamiento. Estos son, mediante infiltración en disolución o mediante infiltración en fundido. Nuestro estudio se centra en los efectos de nanoconfinamiento en la naturaleza semicristalina de los nanohilos, la orientación de los cristales, y la evolución de las estructuras que P3HT podría desarrollar en un espacio limitado. Se han investigado estos aspectos mediante la combinación de imágenes (SEM), espectroscópicas (FTIR, fotoluminiscencia) y caracterización estructural (WAXS, DSC) técnicas. Los nanohilos de P3HT preparados mediante disolución son esencialmente amorfos y poroso, mientras que los nanohilos obtenidos mediante infiltración en estado fundido son semicristalinos, y presentan una morfología más compacta y una superficie más lisa. En este último caso, se encontró que la orientación de los cristales depende en gran medida del diámetro de poro. En nanohilos de mayor diámetro (250 nm y 120 nm), los cristales están orientados, con el apilamiento π - π en paralelo al eje de nanohilos. En contraste, en los nanohilos de pequeño diámetro, la dirección de apilamiento π - π es principalmente perpendicular a los nanohilos, en forma de cristales, probablemente nucleada en paredes de los poros.

Selección del diámetro de nanotubos de carbono en nanocables de polímero/SWCNT preparados mediante infiltración de plantillas

En colaboración con la Prof. Concepción Domingo, hemos investigado la dispersión de SWCNT (nanotubos de carbono de pared única) en nanocables de polímero/SWCNT. Los nanocables de polímero/SWCNT soportados sobre una película de residual de nanocompuesto se preparan mediante la infiltración desde el fundido de membranas de alúmina (AAO). El parámetro de agregación de SWCNTs extraído del análisis de sus modos de respiración radial Raman da el valor más alto para los SWCNTs nativos, lo que indica que tienden a organizarse en haces que dan lugar a un alto grado de agregación. Sin embargo, el valor más bajo alcanzado en la interfase entre la película y los nanocables se explica teniendo en cuenta que las fuerzas que actúan durante la infiltración son capaces de disgregar los haces de SWCNT

induciendo dispersión de los nanotubos. Además, el mapeo a lo largo de la longitud de los nanocables mediante microscopía Raman ha mostrado una selección de diámetros de los SWCNTs por la membrana AAO. Los resultados revelan que es posible fabricar matrices de nanocables con distribución homogénea de SWCNT a lo largo de decenas de micras, optimizando la dispersión de nanotubos.

Investigación de las propiedades mecánicas a escala nanométrica

Se ha incorporado al bagaje experimental del laboratorio la evaluación cuantitativa de las propiedades mecánicas (Módulo elástico, fuerzas de adhesión y deformación) de materiales poliméricos a escala nanométrica mediante el uso del microscopio de fuerzas atómicas (AFM) implementando la técnica de “Peak Force Tapping”. En particular se han realizado un estudio cuantitativo de las propiedades mecánicas a escala nanométrica de bionanocomposites compuestos de ácido poliláctico, goma natural y distintos tipos de arcillas. Los resultados han permitido discriminar los distintos niveles de compatibilidad de las arcillas con los otros dos componentes.

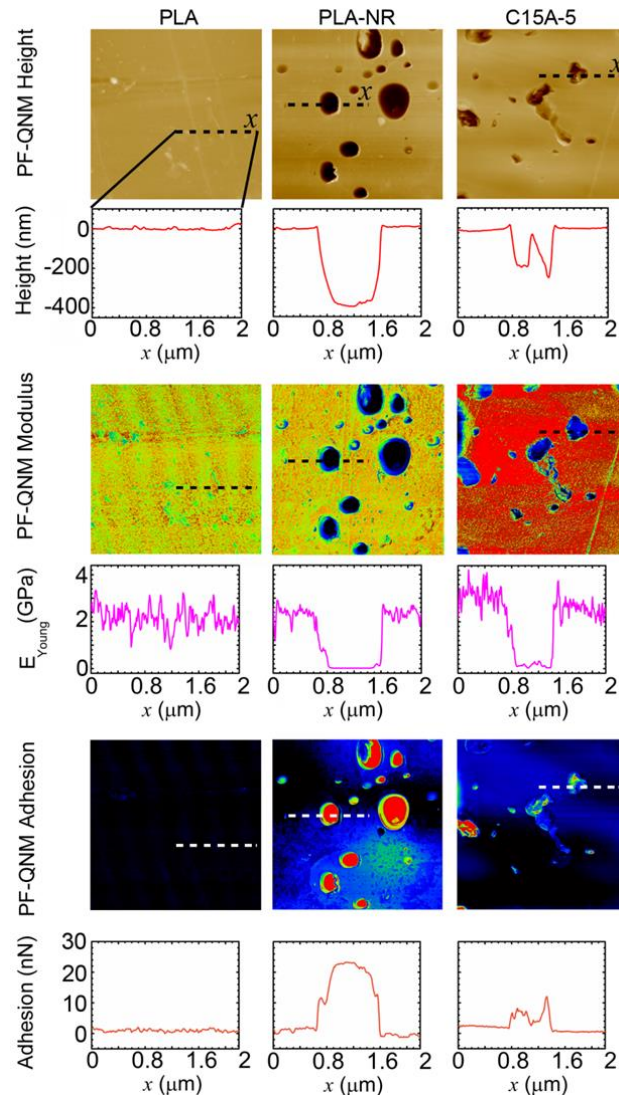


Fig. Y. Imágenes ($5 \times 5 \mu\text{m}^2$) QNM de bionanocomposites de ácido poliláctico(PLA), goma natural(NR) y arcilla(C15A). Desde arriba abajo: topografía, modulo elástico y fuerza de adhesión y sus perfiles correspondientes a lo largo de las líneas indicadas en las imágenes.

Investigación de las propiedades termomecánicas de polímeros mediante micropalanca

En colaboración con la empresa MECWINS se ha demostrado la posibilidad de usar micropalanca para la evaluación de las propiedades térmicas de polímeros. En particular, se ha realizado un estudio de la fusión de una capa delgada de un polímero modelo depositada sobre una micropalanca en la que se ha medido su deflexión en función de la temperatura. La fusión del polímero pudo ser evaluada mediante técnicas de dispersión de rayos X en incidencia rasante y con luz de sincrotrón realizadas sobre una única micropalanca.

SEPARACIÓN DE FASES EN MEZCLAS DE POLÍMEROS CONJUGADOS CON APLICACIONES EN CÉLULAS SOLARES ORGÁNICAS

Hemos investigado mezclas de polímeros conjugados de poli-3-hexiltiofeno (P3HT) y poli[N - 9- heptadecanilo - 2,7- carbazol -alt-5,5-(4', 7'-di-2-tienilo 2', 1', 3' benzotiadiazol)] (PCDTBT), con aplicación en células solares poliméricas (PSC). Las PSCs utilizan como capa fotoactiva películas delgadas donde un material donante de electrones (tipo p) y un material aceptor de electrones (tipo n) forman una red interpenetrada de fases separadas de tamaño nanométrico, que proporciona grandes áreas de intercaras, necesarias para la disociación eficiente del excitón y un camino continuo para el transporte de carga.

Mapeo composicional mediante micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM)

Las películas delgadas mezclas de P3HT/PCDTBT con diferentes espesores han sido preparados por spin-coating . Se ha investigado la composición mediante micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM), que ofrece una excelente combinación de espectroscopia e imagen con dosis bajas de radiación. Como técnica potente basada en luz sincrotrón, STXM proporciona un mapeo cuantitativo de la composición química de películas orgánicas con una resolución a escala nanométrica. Las imágenes STXM pueden proporcionar información sobre los tamaños de dominio, formas y grados de pureza en películas delgadas de mezclas de polímeros con una resolución espacial de ~ 20 nm . La composición y los mapas de espesor revelan una estructura de dominios ricos en P3HT más delgados rodeados por una matriz de PCDTBT más gruesa.

Investigación del transporte de carga a escala nanométrica

En el Microscopio de Fuerzas Atómicas del grupo se ha implementado un módulo de propiedades eléctricas (C- AFM). Se ha utilizado dicho módulo para caracterizar las propiedades eléctricas a escala nanométrica de las películas delgadas de la mezcla P3HT/PCDTBT (1:1). Las imágenes de corriente de huecos se utilizaron para investigar las variaciones de corriente y para mapear la red conductora de P3HT en la mezcla P3HT/PCDTBT. Además de la imagen de corriente, con C-AFM se pueden medir también curvas I-V locales. Esta técnica de medida de las características I-V por C-AFM es única porque permite investigar una región muy pequeña de la película, comparable a la zona de contacto de la punta. Por lo tanto, se pueden examinar distintas áreas que proporcionan información sobre la heterogeneidad eléctrica de la película.

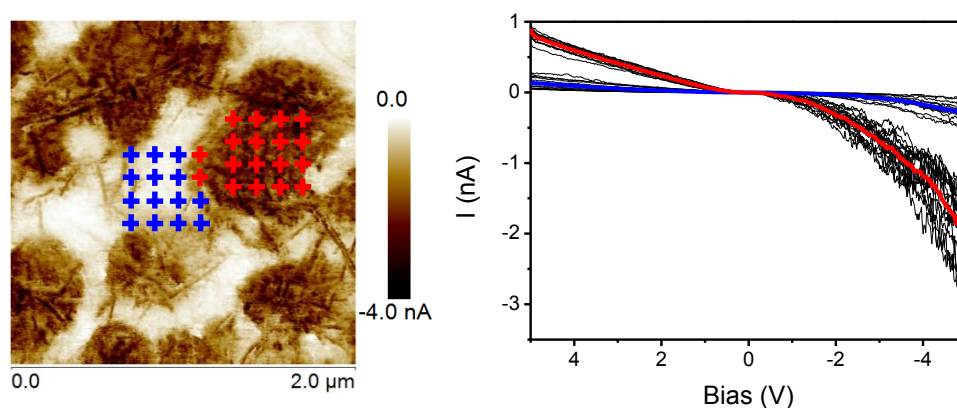


Fig. Z. Imagen de corriente en modo contacto de la mezcla P3HT/PCDTBT (izquierda). Las cruces azules y rojas indican las posiciones en las que se midieron curvas I-V (derecha). También se han incluido las curvas I-V promedio, la roja correspondiente a los dominios ricos en P3HT y la azul a los dominios ricos en PCDTBT.

DINÁMICA EN CONDICIONES DE CONFINAMIENTO EN MATERIA CONDENSADA BLANDA Y POLIMÉRICA

Dinámica de confinamiento en alcoholes y polímeros

Se han estudiado las transformaciones de fase del etanol combinando de forma simultánea técnicas de difracción de neutrones y de espectroscopía dieléctrica. Los resultados apoyan que una significativa reorganización de la red de puentes de hidrógeno del líquido subenfriado ocurre como un paso previo a la aparición de la fase cristalina. Dentro de la misma problemática se ha continuado con el estudio mediante espectroscopía dieléctrica de la cristalización de poliésteres aromáticos. En particular hemos investigado la cristalización en tiempo real del poli(tereftalato de pentametileno). La comparación con trabajos anteriores ha permitido profundizar en el origen y naturaleza de la fase amorfa rígida que aparece en la mayoría de los polímeros semicristalinos.

“Jamming” en materiales poliméricos: Espectroscopía de Fotocorrelación de rayos X

En colaboración con el grupo de la Prof. C. Mijangos y mediante una técnica novedosa como es la espectroscopía de fotocorrelación de rayos X con luz de sincrotrón hemos investigado la dinámica de xerogeles, aerogeles y sus

nanocompuestos con partículas de óxido de hierro. Se ha puesto en evidencia la existencia a temperatura ambiente de un proceso de relajación lento de carácter hiperdifusivo que hemos asignado a los movimientos de las paredes de los poros y que presenta las características de una dinámica tipo “jamming” como la exhibida por sistemas constituidos por partículas que interaccionan por fuerzas repulsivas de corto alcance.

Dinámica y cristalización en películas delgadas de polímeros

En colaboración con el Dr. Simone Napolitano, de la Université de Libre de Bruxelles, se ha estudiado el papel de las interfaces en la dinámica y la cristalización de polímeros. En confinamiento nanométrico, los polímeros cristalizan más lentamente que sin confinar, llegando incluso a inhibirse la formación de estructuras ordenadas. Se realizó un seguimiento de la cinética de cristalización mediante espectroscopia de relajación dieléctrica. Los resultados se analizaron de acuerdo con un desarrollo analítico que permite evaluar la adsorción irreversible de cadenas poliméricas y separar las contribuciones del confinamiento puramente espacial y de los efectos interfaciales. Mediante este método es posible obtener el gradiente de la movilidad segmental en el sistema. De los resultados obtenidos se deduce que la adsorción irreversible de las cadenas sobre los electrodos de Aluminio, es la responsable de la reducción de la movilidad molecular en comparación con el sistema sin confinar.

ESTRUCTURA DE COMPUESTOS CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTITUMORAL

En colaboración con el Prof. F. Díaz del Centro de Investigaciones Biológicas (CIB-CSIC), hemos caracterizado la interacción microtúbulo-taxano en una familia de taxanos con alta actividad en las células tumorales resistentes a la quimioterapia, así como sus efectos celulares. Comparados con otros compuestos de la familia de los taxanos, los aquí investigados presentan una mejora en su potencia para inducir el ensamblado de la tubulina, a pesar del hecho de que sus interacciones con los sitios de unión de microtúbulos (poro y lumenales) son similares, como se demuestra en este estudio mediante resonancia magnética nuclear y scattering de rayos X a bajo ángulo.

PREPARACIÓN DE COMPUESTOS POLIMÉRICOS CONSTITUIDOS POR POLI (FLUORURO DE POLIVINILIDENO) Y DIFERENTES ADITIVOS BASADOS EN CARBONO

Se ha procedido a preparar materiales compuestos, constituidos por un polímero y diferentes concentraciones de diversos aditivos basados en carbono. Como matriz polimérica se ha empleado el polifluoruro de vinilideno (PVDF) y como aditivos: nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT), grafito expandido (EG), nanofibras de carbono (CNF) y grafito (G). Todos los materiales han sido caracterizados tanto térmica (calorimetría diferencial de barrido, DSC) como estructuralmente (dispersión de rayos X a ángulos altos, WAXS). Así mismo, mediante espectroscopia dieléctrica se ha llevado a cabo un estudio para determinar sus propiedades eléctricas. Se ha concluido que: 1º) Los aditivos utilizados (independientemente del tipo) apenas afectan a las propiedades térmicas de la matriz polimérica. Aunque sí actúan como agentes nucleantes en el proceso de cristalización del polímero; 2º) Todos los materiales presentan como forma cristalina predominante la fase α del PVDF. Por otra parte, a excepción de los compuestos que llevan como aditivo los nanotubos de carbono, en el resto de sistemas, con altas concentraciones de aditivo, también se observa la fase β y 3º) Excepto para los compuestos que contienen grafito, en el rango de concentraciones estudiado, se obtienen buenos valores tanto de conductividad como de constante dieléctrica, a bajos umbrales de percolación.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

SIMULACIÓN DE SISTEMAS MACROMOLECULARES SINTÉTICOS

Cristalización de poliolefinas en presencia de nanotubos de carbono. El efecto de los nanotubos de carbono en las propiedades físicas de matrices compuestas por poliolefinas es objeto de gran interés de cara al diseño de nuevos materiales. A nivel atómico, solamente la simulación puede ofrecer información sobre los detalles estructurales de dicho tipo de compuestos. Uno de los aspectos claves que determinan las propiedades físicas de los materiales poliolefinicos es el proceso de cristalización de los mismos. Para entender mejor dichos procesos se han realizado una serie sistemática de simulaciones a escala atómica de sistemas conteniendo un nanotubo de carbono y una cadena de polietileno con diversos grados de ramificación. Se han estudiado propiedades estructurales tanto estáticas como dinámicas del complejo formado por la interacción de dichas macromoléculas. Entre otros resultados, se obtiene que la presencia del nanotubo constituye un agente nucleante de la poliolefina, y sigue el mismo patrón respecto a la inclusión de ramificación que el observado en el caso sin nanotubo.

Cristalización de alcanos ultralargos. Los modelos de alcanos ultralargos son ideales para el estudio de los primeros pasos en la cristalización de poliolefinas. En esta ocasión se simulan procesos de cristalización por subenfriamiento del fundido teniendo en cuenta adicionalmente la presencia de ramificación de cadena corta. Precisamente la incorporación de ramas de cadena corta resulta en una ralentización del proceso de nucleación respecto de los casos lineales. Además estas estructuras que incorporan un relativamente bajo contenido en ramificación afectan dramáticamente a distintas características de los cristales formados tales como la anchura del cristal y el empaquetamiento de cadenas. La longitud

de las ramas también afecta a su inclusión o no en los núcleos cristalinos, resultando, en formas diferentes de distorsión en la formación de cristales.

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Se ha llevado a cabo el estudio de las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas, de sus mezclas y de sistemas nanocompuestos con nanotubos de carbono, tanto en el estado fundido como en el estado sólido, en el marco de colaboraciones con distintos grupos de investigación, tanto a nivel industrial como académico. Se ha investigado la influencia de la arquitectura molecular en la miscibilidad de poliolefinas de interés industrial. Las medidas reológicas y diversos tratamientos de los resultados basados en modelos físicos ponen de manifiesto el papel de la ramificación de cadena corta en la miscibilidad de las mezclas, y por tanto en las propiedades finales. En general se encuentra que las mezclas de polietileno de baja densidad y de polietileno lineal de baja densidad son inmiscibles para contenidos de ramificación bajos. La miscibilidad entre los componentes se produce a contenidos elevados de ramificación, sugiriendo un fuerte efecto del estado conformacional de las macromoléculas en el proceso de mezcla. También se ha estudiado el efecto sinérgico causado por nanotubos de carbono en distintas matrices de polietileno de distinta arquitectura molecular. La microscopía electrónica ha demostrado una excelente dispersión de los nanotubos en todos los casos estudiados. Las propiedades reológicas y calorimétricas han resultado ser fuertemente dependientes por el contenido en ramificaciones y el peso molecular de las matrices poliméricas. En términos comparativos los resultados sugieren que el peso molecular puede llegar a enmascarar el efecto de los nanotubos, en lo que se refiere a las propiedades geológicas, aunque por otra parte juegan un papel importante en el proceso de nucleación. Por otro lado la ramificación causa otro marcado efecto, desacelerando los procesos de orden. Desde un punto de vista más básico se ha llevado a cabo el estudio del efecto de la ramificación en el hábito cristalino de cristales únicos obtenidos desde disoluciones diluidas. La ramificación causa una rugosidad típica en los bordes del cristal, que se incrementa al aumentar el contenido en ramificación en los polímeros. Si bien se produce un descenso de los espesores del cristal y la cristalinidad, todos los materiales presentan cristales ortorrómbicos, aunque con dimensiones de celdilla definitivamente mayores que en el caso del polímero lineal.

SIMULACIÓN DE SISTEMAS MACROMOLECULARES BIOLÓGICOS

Preferencia conformacional de tripéptidos tipo GXG. Los tripéptidos compuestos por un aminoácido central flanqueado por dos glicinas es un modelo frecuentemente usado para estudiar la estructura de proteínas desnaturalizadas y los primeros procesos de plegamiento que conducen a la estructura bioactiva. En adición a los distintos estudios experimentales reportados en la literatura, basados en metodologías espectroscópicas, que arrojan resultados un tanto divergentes se está desarrollando en nuestro grupo un estudio sistemático usando modelos de mecánica molecular clásica y mecánica cuántica. Se pretende aportar información detallada a nivel atómico que pueda ayudar a interpretar los hallazgos experimentales.

Receptores de factor de crecimiento epitelial (EGFR). Complementando las simulaciones realizadas el año anterior sobre el receptor completo embebido en la bicapa lipídica realizada a escala de grano grueso, se han determinado los parámetros de la simulación que mejor comparativa presentan respecto a los modelos atómicos. En particular, resulta metodológicamente relevante que el “campo de fuerzas” Martini usado en las simulaciones de “grano grueso” es compatible con el empleo de modelos PME para contabilizar las interacciones electrostáticas y poder así usar la tecnología de GPU que tan altas prestaciones está dando en el campo de la simulación. Por otra parte, se han realizado cálculos de propiedades hidrodinámicas sobre los dominios extracelulares del receptor ErbB2 y del anticuerpo Trastuzumab con objeto de comparar los resultados de simulación con los datos obtenidos experimentalmente sobre estas mismas especies en nuestro grupo.

Modelo de autómatas celulares para la enfermedad de Chagas. El proyecto consiste en construir y simular un modelo matemático para estudiar la evolución del parásito causante de la enfermedad de Chagas dentro del cuerpo humano. Se decidió usar un modelo basado en autómatas celulares que realiza una simulación en tiempo y espacio discreto. Para ello se crearon unas reglas de interacción entre ciertos agentes (parásito y sistema inmune del huésped), y seguir su evolución por una malla de dos dimensiones de acuerdo a estas reglas. El modelo final da lugar a un número de parámetros, algunos de los cuales se han podido encontrar en bibliografía, y otros se han variado en rangos estudiando los diferentes resultados. Los resultados obtenidos coinciden cualitativamente con aquellos medidos en pacientes. Continuamos trabajando en el refinamiento y nuevas simulaciones de este modelo.

BIOFÍSICA: HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades de macromoléculas biológicas como las proteínas y otros complejos macromoleculares permite obtener información sobre su función en su contexto biológico. Con este fin, se están estudiando diferentes sistemas: (i) receptores del factor de crecimiento EGFR o ErbB, (ii) complejos de la cápsida vírica del HIV (proteínas gp); (iii) cápsidas virales sintéticas (VLPs); y (iv) reflectina y sus mutantes. Estos estudios se han realizado en colaboración con grupos nacionales (IQFR/CSIC) e internacionales (Sino Biological Ltd., Beijing). Gracias

a ellos estamos aportando información sobre la capacidad de formar complejos con anticuerpos utilizados en el tratamiento del cáncer como el Trastuzumab (en el caso de las proteínas EGFR), sobre la flexibilidad de los complejos (en el caso de las glicoproteínas de la membrana del HIV), sobre los procesos de maduración de las VLPs utilizadas por ejemplo como vehículos en terapias génicas, y en los procesos de autoensamblaje para la constitución de redes complejas (en el caso de los mutantes de reflectina).

MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN en BIOPHYM

La instalación de microscopía electrónica de transmisión del BIOPHYM ha sido utilizada a petición de diversos grupos del IQFR, ICTP e IEM del CSIC. Se han estudiado las características estructurales y morfológicas de nanopartículas y materiales poliméricos o materiales compuestos de ambos. Las muestras se estudiaron bien como partículas independientes o como secciones ultra-finas. Algunos de los sistemas estudiados son: nanopartículas de platino, plata, oro, óxido metálico y “quantum dots”; nanopartículas de oro recubiertas de sílice; magnetita recubierta de oro, plata, sílice; secciones ultrafinas de matrices poliméricas reforzadas con cargas como, por ejemplo, nanopartículas de carbono, titanio, nanoarcillas, nanotubos de carbono, grafeno, etc.; y micelas y vesículas poliméricas. En la mayoría de los casos se pretende conocer la nanoestructura de las partículas o la dispersión y organización de las nanocargas en matrices poliméricas.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

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

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Computational methods in gravitational physics.
- Black hole analogues in condensed matter.
- Combinatorics.
- Quantum field theory.
- Models of quantum gravity and fractal geometry.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear Structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Exactly solvable models.
- Atoms and molecules in the quantum-degenerate regime or in optical lattices.
- Quantum simulation and quantum metrology.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.
- Van der Waals interaction in ZIFs

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Numerical methods to solve non linear couples equations.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Renormalization group.
- Highly correlated ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY:

GRAVITATION AND COSMOLOGY

The Gravitation and Cosmology Group has continued the work on the quantization of inhomogeneous cosmologies during 2014, focusing on the consequences of the quantization of the geometry on cosmological perturbations and the imprints on the Cosmic Microwave Background. We studied the evolution of a homogeneous and isotropic spacetime (a Friedmann-Robertson-Walker spacetime) coupled to a massless scalar field with small scalar perturbations within Loop Quantum Cosmology, using a proposal for the effective dynamics based on a previous hybrid quantization completed by us. We introduced a convenient gauge fixing and adopted reduced canonical variables adapted to that hybrid quantum description. Besides, we kept backreaction contributions on the background coming from terms quadratic in the perturbations in the action of the system. We carried out a numerical analysis assuming that the inhomogeneities were initially (at distant past) in a massless vacuum state. At distant future, we observed a statistical amplification of the

modes amplitude in the infrared region, as well as a phase synchronization arising from quantum gravity phenomena. Finally, we analyzed some consequences of the backreaction in our effective description.

We also studied cosmological perturbations in the framework of Loop Quantum Cosmology using Mukhanov-Sasaki variables in the hybrid quantization approach. The formulation in terms of these gauge invariants allows one to clarify the independence of the results on choices of gauge and facilitates the comparison with other approaches proposed to deal with cosmological perturbations in the context of Loop Quantum Theory. We employed a kind of Born-Oppenheimer ansatz to extract the dynamics of the inhomogeneous perturbations, separating them from the degrees of freedom of the Friedmann-Robertson-Walker geometry. With this ansatz, we derived an approximate Schrödinger equation for the cosmological perturbations and studied its range of validity. We also proved that, with an alternate factor ordering, the dynamics deduced for the perturbations is similar to the one found in the so-called dressed metric approach, apart from a possible scaling of the matter field in order to preserve its unitary evolution in the regime of Quantum Field Theory in a curved background and some quantization prescription issues. Finally, we obtained the effective equations that are naturally associated with the Mukhanov-Sasaki variables, both with and without introducing the Born-Oppenheimer ansatz.

In addition to all this, and in order to contemplate the possibility of signature changes in the quantum geometry, we studied the quantization of Klein-Gordon type scalar fields in nonstationary spacetimes, such as those found in cosmology, assuming that all the relevant spatial dependence in the field equations is contained in the Laplacian. We showed that the field description and the Fock representation for the quantization of the field are fixed indeed in a unique way (except for unitary transformations that do not affect the physical predictions) if we adopt the combined criterion of (a) imposing the invariance of the vacuum under the group of spatial symmetries of the field equations and (b) requiring a unitary implementation of the dynamics in the quantum theory. Besides, we provided a spacetime interpretation of the field equations as those corresponding to a scalar field in a cosmological spacetime that is conformally ultrastatic. In the privileged Fock quantization, we investigated the generalization of the evolution of physical states from the hyperbolic dynamical regime to an elliptic regime, owing to processes with signature change in the spacetime where the field propagates. We discussed the behavior of the background geometry when the change happens, proving that the spacetime metric degenerates. Finally, we argued that this kind of signature change leads naturally to a phenomenon of particle creation, with exponential production.

In our study of inhomogeneities in Loop Quantum Cosmology, on the other hand, we also developed approximation methods in the hybrid quantization of the Gowdy model with linear polarization and a massless scalar field, for the case of three-torus spatial topology. The Gowdy models are cosmological inhomogeneous spacetimes with symmetries that simplify the analysis. The Loop Quantization of the homogeneous gravitational sector of the Gowdy model and the presence of inhomogeneities lead to a very complicated Hamiltonian constraint. Therefore, the extraction of physical results calls for the introduction of well justified approximations. We first showed how to approximate the homogeneous part of the Hamiltonian constraint, corresponding to anisotropic Bianchi I geometries, as if it described an isotropic Friedmann-Robertson-Walker model corrected with anisotropies. This approximation is valid in the sector of high energies of the Friedmann-Robertson-Walker geometry and for anisotropy profiles that are sufficiently smooth. In addition, for certain families of states related to regimes of physical interest, with negligible quantum effects of the anisotropies and small inhomogeneities, one can approximate the Hamiltonian constraint of the inhomogeneous system by that of a Friedmann-Robertson-Walker geometry with simple matter content, and then obtain its solutions.

Besides, we have considered the problem of quantum correlations in the geometry across gravitational horizons. Classically, different spacetime regions separated by horizons are not related to each other. We carried out a canonical quantization of a Kantowski-Sachs minisuperspace model whose classical solutions exhibit both an event horizon and a cosmological horizon in order to check whether the above statement also holds from the quantum gravitational point of view. Our analysis showed that, in fact, this is not the case: Quantum gravitational states with support in spacetime configurations that exclusively describe either the region between horizons or outside them are not consistent in the sense that there exist unitary operators describing a natural notion of evolution that connect them.

We also have given a detailed description of electrodynamics as an emergent theory from condensed-matter-like structures, not only per se but also as a warm-up for the study of the much more complex case of gravity. We started with Maxwell's mechanical model for electrodynamics. We next took a superfluid ^3He -like system as representative of a broad class of fermionic quantum systems whose low-energy physics reproduces classical electrodynamics.

The white-hole sector of Kruskal's solution is almost never used in physical applications. However, it might contain the solution to many of the problems associated with gravitational collapse and evaporation. There exist some bouncing geometries that make a democratic use of the black- and white-hole sectors. These types of behavior could be perfectly natural in some approaches to the next physical level beyond classical general relativity.

Concerning other issues, it is commonly accepted that general relativity is the only solution to the consistency problem that appears when trying to build a theory of interacting gravitons (massless spin-2 particles). We have presented the self-coupling problem in detail and explicitly solved the infinite-iterations scheme associated with it for the simplest theory of a graviton field. We have made explicit the non-uniqueness problem by finding an entire family of solutions

to the self-coupling problem. Then we have shown that the only resulting theory which implements a deformation of the original gauge symmetry happens to have essentially the structure of unimodular gravity. This makes plausible the possibility of a natural solution to the first cosmological constant problem in theories of emergent gravity. Later on we have changed to Fierz-Pauli theory, an equivalent theory but with a larger gauge symmetry. As one requires the (deformed) preservation of internal gauge invariance, one naturally recovers the structure of unimodular gravity or general relativity but in a version that explicitly shows the underlying Minkowski spacetime, in the spirit of Rosen's flat-background bimetric theory.

One of the most peculiar features of the quantization used in Loop Quantum Gravity is the non-separability of the kinematical Hilbert spaces used in this setting. The expectation is that this will not be an issue in the final formulation of quantum gravity as the physical Hilbert spaces determined by the solutions to the quantum constraints will, very likely, be separable. In any case there are a number of questions that have been not answered in a completely satisfactory way which, hence, deserve some attention: in particular the statistical mechanics of these models, superselection, and the characterization of the ambiguities introduced by the polymer scale. A natural setting to study them is provided by the so called polymer quantum mechanics, which incorporates some of the most unusual features of the quantization of general relativity used in LQG and is especially relevant for Loop Quantum Cosmology. In recent years we have paid attention to the study of simple systems —such as the polymerized harmonic oscillator— in one dimension with the hope of gaining a good grasp on the less-familiar features associated with non-separability. In the last year we have considered, in collaboration with Dr. Tomasz Pawłowski —a former member of the group—, the extension of some of our results to the study of some particular models in quantum cosmology. The key idea has been to replace non-separable spaces with separable ones while introducing appropriate measures in the spectrum of the relevant operators defining quantum observables. Although this idea may finally turn out to be too simple it is quite useful to understand non-separability and issues related to superselection.

The work carried out by the group on black hole entropy in LQG in recent years led to the development of several mathematical tools which were needed to solve the combinatorial problems involved in the entropy computations. A mathematical spin-off of this work has led to the solution of a long standing problem in combinatorics stated in the renowned book *Concrete Mathematics* by Graham, Knuth and Patashnik. The problem in question asked to solve and characterize the solutions to a very general six-parametric linear recurrence whose solutions encompass broad families of well-known combinatorial numbers including binomial coefficients, Stirling numbers, Eulerian numbers and many others. The resolution was based on the use of bivariate generating functions similar to the ones used by the group to study black holes. A surprising discovery was the identification of a phenomenon that just begs to be called *gauge invariance*, i.e. the existence of different sets of parameters leading to the same families of combinatorial numbers. The work has been published in the prestigious Journal of Combinatorial Theory, Series A and has been followed by a paper on applications of the formalism developed therein (under consideration at the present moment in the Electronic Journal of Combinatorics).

An important problem also suggested by the activity of the group on black hole physics is the rigorous study of the Hamiltonian formulation for field theories in the presence of boundaries. Remember that the model presently used to describe black holes in the LQG framework hinges upon the use of the so called *isolated horizons* and the formulation of general relativity in space-time manifolds with inner boundaries. The origin of the quantum degrees of freedom which account for the entropy is somewhat mysterious and, in particular, the connection between the classical and quantum degrees of freedom is not completely clear. With the aim of clarifying this issue and developing a rigorous understanding of the sector of general relativity containing space-time boundaries we have started to study the rigorous Hamiltonian formulation for field theories in bounded spatial regions. One of the goals of this work is to characterize those field theories for which boundary degrees of freedom appear in a natural sense. The first paper on this subject, published in Classical and Quantum gravity and distinguished as a Highlight of the year 2014 by this prestigious journal, was devoted to the study of scalar and electromagnetic fields in bounded and smooth regions subject to several types of boundary conditions (Dirichlet, Neumann, Robin and others specific of the EM field). In those examples we have been able to rigorously prove that no boundary degrees of freedom arise. In the present moment we are extending the results of this work to parametrized fields and also to models where fields are coupled to point particles. These works —in progress or under consideration for publication— will shed further light on the issue of the existence of genuine boundary degrees of freedom and black hole entropy.

Within loop quantum cosmology, we have studied the possibility to obtain the homogeneous LQC equations from group field theory, a background-independent theory supposedly more fundamental than loop gravity. In this case, we have used a condensate quantum state to reproduce a cosmological background in the continuum limit. We have also explored other theories of quantum gravity, where we stressed the change of properties of the effective geometry with the change in the resolution. (i) In the nonlocal theory proposed by G. Calcagni and L. Modesto, we have constructed a gravitational Lagrangian in 11 dimensions with nonlocal operators, reproducing various characteristics of M theory and of string field theory. Concerning cosmology, we have shown that it is possible to replace the big-bang singularity with a classical bounce due to the presence of nonlocal operators. We have also discussed the same nonlocality in string theory. (ii) We have developed the electrodynamics (classical and quantum) and the cosmology of multiscale

spacetimes, recently proposed theories where geometry changes with the scale in a manner similar to that of multifractals. The geometric measure naturally produces an era of cyclic contractions and expansions that can leave a unique imprint in the primordial inflationary spectra. The cosmological constant dominating the late universe is reinterpreted as an effective “potential” generated by the geometric measure and necessary for the self-consistency of the solutions. (iii) We placed observational constraints on noncommutative, brane, and quantum-tunneling cosmological models, thus ruling out experimentally the first two classes of models thanks to Planck data. (iv) We have started the study of the spectral dimension (which indicates the number of effective dimensions felt by a test particle) in quantum gravities with discrete geometries, including spin foams and loop gravity.

Last, we have installed and tested successfully the FORTRAN program CosmoMC (Monte Carlo cosmological simulations) on the Trueno cluster. CosmoMC is a fundamental instrument to place observational constraints on theoretical models of the early universe and it will allow us to verify experimentally and directly the inflationary predictions of many of the models discussed here. IEM-CSIC thus becomes the first national node equipped with this important numerical-cosmology code.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Decay properties in exotic nuclei of astrophysical interest

In the last year we have investigated the decay properties of nuclei involved in the stellar nucleosynthesis. We paid special attention to the medium-heavy neutron-rich isotopes participating in the rapid neutron capture process (r process) in astrophysical scenarios. This process is considered to be one of the main nucleosynthesis mechanisms leading to the production of heavy neutron-rich nuclei and for the existence of about half of the nuclei heavier than iron in the universe. The r-process nucleosynthesis involves many neutron-rich unstable isotopes, whose masses and β -decay properties are crucial quantities to understand the possible r-process paths, the isotopic abundances, and the time scales of the process. Although much progress has been done recently on masses and half-lives measurements, unfortunately most of the nuclear properties of relevance for the r process are experimentally unknown yet due to their extremely low production yields in the laboratory. Therefore, reliable nuclear physics models are needed to interpret the astrophysical observations and to model and simulate properly the r process.

Nuclei in this mass region are interesting in many respects. The mass region is characterized by rapid structural changes in the ground state and low-lying collective excited states. Different studies of the nuclear structural evolution in this mass region show that the equilibrium shape of the nucleus changes rapidly with the number of nucleons, and shape coexistence is present with competing spherical, axially symmetric prolate and oblate, as well as triaxial shapes at close energies. These features are supported by spectroscopic observations including quadrupole moments for rotational bands and laser spectroscopy measurements of charge radii. We investigate the decay properties of both even and odd neutron-rich Zr and Mo isotopes within a deformed proton-neutron QRPA approach based on a self-consistent Hartree-Fock mean field formalism with Skyrme interactions and pairing correlations in the BCS approximation. Residual spin-isospin interactions are also included in the particle-hole and particle-particle channels. The structural evolution in these isotopes is studied first from their energy curves. We found competing oblate and prolate shapes in the lighter isotopes and spherical shapes becoming ground states in the heavier. Then, Gamow-Teller strength distributions, β -decay half-lives, and β -delayed neutron emission probabilities corresponding to the equilibrium shapes of the respective isotopes are computed. We analyze the sensitivity of our results to the various ingredients in the model, including the two-body interactions used to generate the mean field, the pairing gaps, the strength of the residual forces, and the deformation. Predictions for the unknown half-lives, as well as for the detailed structure of the energy distribution of the Gamow-Teller strength are shown.

Continuum three-body wave functions: Resonances, decay modes and reactions

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

More specifically, during the last months our work has been focused in two main issues: The first one concerns the triple-alpha process and its reaction rate at very low temperatures. The fact that at such low temperatures the energies involved are far below the lowest 0^+ resonance in ^8Be implies that a sequential description through that particular two-body resonance is not obvious. In fact we have found that a direct capture description of the process, without populating any intermediate two-body state, could increase the reaction rate by up to 7 orders of magnitude for a temperature of 10^7

GK. We have also studied ^8Be bremsstrahlung cross sections, which is an essential issue to be understood in order to extend the same kind of analysis to the same gamma emission processes in a three-alpha system. The second main topic refers to the description of 1+2 reactions by use of the recently derived two integral relations. We have found the method to be very successful in order to describe processes below the two-body breakup threshold, not only for elastic processes, but also for inelastic and transfer reactions. Application of the same method for energies above the breakup threshold is the obvious next step. This has been achieved very recently, and in particular it has been applied to investigate neutron-deuteron collisions as well as reactions involving three ^4He atoms at very low temperatures, of the order of the μK .

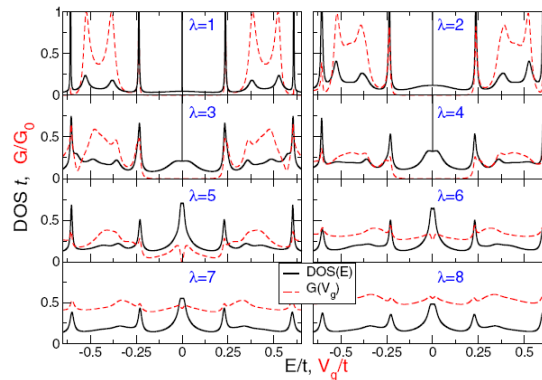
STRONGLY CORRELATED AND MESOSCOPIC SYSTEMS

Quantum transport

Interference effects account for some of the surprises found in quantum physics. In the first years of the study of quantum mechanics, von Neumann and Wigner showed that some particular cases of spatially oscillating attractive potentials support so-called bound states in the continuum (BICs): square-integrable solutions of the time-independent Schrödinger equation with eigenenergies above the potential threshold. BICs can be formed above the barrier because there appears a destructive interference between the different partial wave amplitudes that causes the wave function to vanish at large distances. Given the peculiar long-range oscillating behavior of the potentials constructed by Wigner and von Neumann, for a long time BICs were considered as nothing more than a mathematical curiosity. However, BICs have been found in recent experiments in optical systems and they are currently the subject of a renewed theoretical interest given their possible applications in quantum information, in quantum transport and for energy storage.

We have identified a very general class of systems – systems presenting chiral symmetry – that support BICs when connected to a continuum. In these chiral quantum systems there appear zero energy states in which the wave function has finite amplitude in one of the subsystems defined by the chiral symmetry. When the system is coupled to leads with a continuum energy band, part of these states remain bound. We have derived some algebraic rules for the number of these states depending on the dimensionality and rank of the total Hamiltonian. We have examined the transport properties of such systems including the appearance of Fano resonances in some limiting cases. Also, we have proposed experimental setups based on microwave dielectric resonators and atoms in optical lattices to test these predictions.

Quantum transport. *Density of states (DOS, black lines) and conductance (red lines) for a square lattice of 10×10 sites connected to leads of different sizes, $\lambda=1,2,\dots,8$. Note the peak in the DOS at the band center, $E=0$, while the conductance remains zero for $\lambda \leq 4$, which points to the presence of BICs. Figure from J. Mur-Petit, R.A. Molina, *Phys. Rev. B* **90**, 035434 (2014).*



Hierarchical Mean Field Theory

The Hierarchical Mean Field Theory (HMFT) is based on an exact mapping between the states of a spin cluster in lattices of one or more dimensions and a system of composite bosons, whose internal degrees of freedom are in a one-to-one correspondence with states of the Hilbert space of the cluster. The composite boson Hamiltonian, which is an exact image of the original spin Hamiltonian, is treated in mean field. Therefore, the short range correlations within the cluster are computed exactly, while the interaction between clusters is considered in mean field. We applied this approach to the study of the zero-temperature phase diagram of two-dimensional hard-core bosons on a square lattice with nearest-neighbor and plaquette (ring-exchange) hoppings, at arbitrary density (Physical Review B **89**, 094401 (2014)). In the frustrated regime, where quantum Monte Carlo suffers from a sign problem, we find a rich phase diagram where exotic states with nonzero chirality emerge. Among them, novel insulating phases, characterized by nonzero bond-chirality and plaquette order, are found over a large region of the parameter space. In the unfrustrated regime, the hierarchical mean-field approach improves over the standard mean-field treatment as it is able to capture the transition from a superfluid to a valence bond state upon increasing the strength of the ring-exchange term, in qualitative agreement with quantum Monte Carlo results.

On a different respect, we have extended de HMFT to fermionic systems in lattices of one and two dimensions (Journal of Physics: Condensed Matter 26, 455601 (2014)). In order to accomplish this aim, we introduce a canonical mapping transforming creation and annihilation operators of physical fermions into quadratic products of composite bosons and fermions. Each composite particle represents a unique many-body state in the Fock space of a cluster. From a formal point of view, we showed that this mapping (CBFM) preserves the matrix elements of the physical operators if a hard-core restriction is imposed on the composite particles that live in each cluster.

As a first application of the method, we studied the Hubbard model in 1D and 2D. The composite boson-fermion Hamiltonian was treated in a cluster mean field approximation that decouples fermionic and bosonic terms. In 1D, where the system is always in a Mott insulating phase, we compare our results with the exact Bethe ansatz solution. We verified that HMFT describes very well this insulating phase. However, in 2D at half-filling HMFT has difficulties to describe the phase transition between the Mott insulator phase and the metallic phase. takes place.

Exactly solvable models

Building on a class of integrable pairing Hamiltonians, we present a number-conserving, interacting variation of the Kitaev model, the Richardson-Gaudin-Kitaev (RGK) chain, that remains exactly solvable for periodic and antiperiodic boundary conditions (Physical Review 113, 267002 (2014)). The exactly solvable RGK model is a particular realization of the hyperbolic family of Richardson-Gaudin models which has been previously applied to describe p-wave superconductivity in 2D lattices. Our exact solution allows us to identify fermion parity switches that distinctively characterize topological superconductivity (fermion superfluidity) in generic interacting many-body systems. Although the Majorana zero modes in this model have only a power-law confinement, we may still define many-body Majorana operators by tuning the flux to a fermion parity switch. We derive a closed-form expression for an interacting topological invariant and show that the transition away from the topological phase is of third order. The relevance of the RGK model resides on the fact that it provides an exact many-body solution of a topological system which has been studied up to now at the mean field level.

3D Dirac semimetals

We have investigated the effects of the e-e interaction in three-dimensional (3D) Dirac semimetals, with the aim of mapping the phases that may appear in those systems depending on the strength of the Coulomb interaction. The interest in this subject comes from the recent discovery of 3D materials that have linear electronic dispersion in all the directions of the momentum, thus providing a kind of higher-dimensional analogue of graphene. These 3D systems are dubbed Dirac semimetals to emphasize that their electronic quasiparticles are endowed with a relativistic-like invariance that mimics the symmetry of fundamental particles in high-energy physics. In this respect, the 3D semimetals are governed by a modified version of Quantum Electrodynamics (QED) in which the speed of light is replaced by the Fermi velocity of the electron quasiparticles, providing therefore an instance of electron system which is naturally prone to the strong-coupling regime.

To address the properties of the strongly interacting theory, we have dealt first with an analytic approach to obtain the renormalization of the main physical parameters, like the Fermi velocity and the quasiparticle weight. In this task, we have relied on a $1/N$ expansion, formally assuming a large number N of Dirac fermions, which has allowed us to obtain the dependence on the energy scale of the different renormalized parameters. Thus, by computing the anomalous dimension of the electron field and the scaling of the Fermi velocity, we have been able to show that the theory has a critical coupling at a certain value of the interaction strength (expressed as the ratio between the square of the electron charge and the Fermi velocity). We have found that the critical point is characterized by the vanishing of the quasiparticle weight in the low-energy limit, following a trend in which the Fermi velocity remains bounded. This represents a novel phase in the QED of Dirac semimetals, which in two spatial dimensions (graphene-like systems) are instead characterized by the divergence of the Fermi velocity at weak coupling and by the development of an excitonic instability at strong coupling. The behavior unveiled for the 3D Dirac semimetals falls indeed into the class of marginal Fermi liquids, proposed some time ago to make sense of the unconventional properties of the normal phase of high-temperature superconductors, and having as a distinctive feature the strong attenuation of electron quasiparticles.

On the other hand, the study of the phases of the 3D Dirac semimetals for not too large N has required the use of a complementary approach, based on the resolution of the Schwinger-Dyson equations of the corresponding QED. This is a nonperturbative method that has to be implemented in general with some kind of truncation to guarantee its practical feasibility. In this regard, we have relied on a formulation of the equations that amounts to including all kinds of diagrammatic contributions except those containing vertex corrections. To make contact with the previous results obtained from the renormalization of the quasiparticle parameters, we have carried out a self-consistent resolution for the Dirac propagator, characterized by frequency and momentum-dependent forms of the quasiparticle weight, the Fermi velocity and an additional Dirac fermion mass. In this approach, the recursive resolution of the integral equations has been achieved by attaining convergence after 20-30 iterations. For small values of N , we have found that the solution of the equations displays the spontaneous generation of a fermion mass at strong coupling, signaling a regime with chiral symmetry breaking that is akin to a well-known similar phase in the two-dimensional Dirac semimetals. At

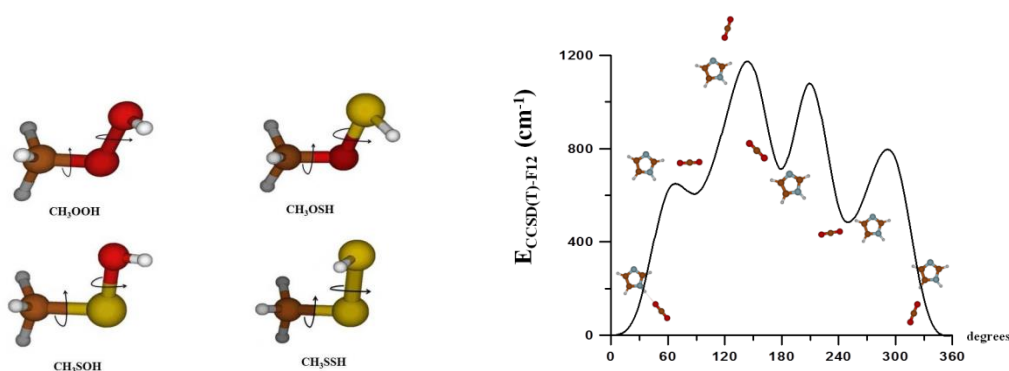
intermediate/large values of N , however, we have seen that the system has a transition for sufficiently strong interaction into a phase with suppression of the electron quasiparticles, in agreement with the results of the analytic large- N approximation. The self-consistent resolution has made also possible to study the behavior of the system beyond the point of the transition, allowing us to characterize precisely the properties of a strongly renormalized electron liquid and, therefore, providing a valuable paradigm for other instances of materials showing non-Fermi liquid behavior.

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

The research group employs highly correlated ab initio methods to characterize molecular species and chemical processes of astrophysical interest, as well as, to describe new materials with application to CO₂ capture and storage.

During the year 2014, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within three sub-lines of research: molecular spectroscopy of non-rigid prebiotic molecules, structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species and determination of properties in non-reactive inelastic collisions at very low temperatures. Always we use as a basic tool, high-level ab initio methods to determine molecular structures and potential energy surfaces. Based on these tools and using our codes ENEDIM and FIT-ESPEC, rovibrational spectroscopic properties are predicted. With close-coupling molecular dynamics calculations collisional properties are determined from Van-der-Waals surfaces. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres.

Since 2004, we have made very detailed and comprehensive studies aimed to the characterization of carbon chains of astrophysical importance gradually increasing the complexity of the systems. These chains are considered relevant isolated species and intermediates of formation processes of large molecules such as PAHs and Fullerenes. Very accurate methods have been used to characterize small chains. Initially we studied pure chains type C_n with a reduced number of atoms (4, 5) which have no permanent dipole moment and are likely to be detected with infrared techniques. In the far infrared region, they can be seen through their bending modes. During 2014, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C_6N in collaboration with researchers from the University of King Saud of Ryad. We have also studied the processes of formation of anions type $C_nX_m^-$ ($X = N, H$) recently detected in circumstellar regions. These species of low stability have permanent dipole moment and therefore are observable through radio astronomy. Taking into account the evolution of the electronic states of low energy throughout the processes of formation and destruction, we have proposed a general rule that predicts the detectability of anions in astrophysical sources. For all the studied carbon chains, we have characterized structures and potential surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonic effects. We predicted possible channels of isomerization, conical intersections and rovibronic effects.



The new radioastronomical observatories will allow the detection of new molecules and new isotopic varieties if their rotational spectra in the millimeter and sub-millimeter regions are recorded and analyzed at the laboratory level. Highly correlated ab initio calculations allow determine molecular structures, as well as to obtain initial sets of spectroscopic parameters that can facilitate the assignments of these spectra. Special interest show the calculation aimed to the spectroscopic characterization of non-rigid prebiotic species that present vibrational levels likely to be populated at very low temperatures. These are suitable of been detected in vibrational excited states in star formation areas. This year 2014, special attention has been to the sulfur organic molecules such as ethyl mercaptan and the sulfur derivatives of methyl peroxide.

Finally, within the environment of Marie Curie FP7-CAPZEO action, we are conducting studies of the interaction of CO₂ and water with imidazoles. The aim is to predict the ability of materials type ZIF (Zeolitic Imidazolate

Frameworks) for the caption and storage of atmospheric species. Molecular calculations (interaction potentials and structures) take advantage in future studies of simulation of solids.

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

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.
- Surface Spectroscopies.
- Optics & Photonics.
- Surface Plasmon Photonics and Metamaterials.
- Biospectroscopy.
- Chemical-Physics of Deposition and Ablation Processes.
- Biological applications of vibrational spectroscopy.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of dripline nuclei.
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Nuclear Instrumentation.
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot).
- Data Analysis tools.
- Nuclear Physics experiments for FAIR.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- 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.
- Plasmonics in metal nanostructures.
- Optical Metamaterials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Plasmon resonances on metal nanostructures (Nanoantennae): Raman and Fluorescence.
- Metamaterials in the optical range.
- Infrared Laser Induced Ablation Plasmas.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy in Laser Induced Plasmas.
- Detection of infrared and Raman spectroscopic markers for diagnosis of neurodegenerative and neoplastic diseases.
- Molecular structure of proteins and lipids in functional food.
- Nanostructure of Artificial Building Conglomerants.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE and REX-ISOLDE@CERN.
- Reaction studies at low energy at the 5MV accelerator CMAM@UAM.

- Reaction studies at relativistic energies, the R3B experiment at GSI.
- GEANT4 Monte Carlo simulation of experimental set-up and detectors.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Mathematics and computing methods.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Numerical simulation.
- Computational methods.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Gas adsorption techniques.
- Absorption techniques.
- IR Spectroscopy (Normal, FTIR, micro IR and SEIR).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of two dimensional correlations by H/D isotopic exchange.
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Theoretical Physics (Classical Electrodynamics) and Numerical Calculations.
- Theoretical Physics: Classical Electrodynamics.
- Infrared Spectroscopy (FTIR).
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Raman Spectroscopy (FT, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging).
- Optical Emission Spectroscopy (OES).
- Laser Induced Fluorescence (LIF).
- Laser Physical Deposition (LPD).
- Multivariate Statistical Analysis.
- Time- and space-resolved Imaging techniques.

RESEARCH ACTIVITY:

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES AND RELEVANT REACTIONS IN STELLAR NUCLEOSYNTHESIS PROCESSES

DETERMINATION OF THE CROSS SECTION FOR THE REACTION ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ (Proyecto FPA2012-32443, (Research contract M. Carmona-Gallardo, Olof Tengblad)

One of our goals is to measure the cross section of the ${}^4\text{He}({}^3\text{He},\gamma){}^7\text{Be}$ nuclear reaction. The astrophysical relevance of this reaction is two-fold. On one hand it plays a determining role in the prediction of the solar neutrino flux. Among all nuclear inputs parameters of the Standard Solar Model, the cross section of this reaction is the major source of uncertainty. On the other hand this reaction is important in the Big-Bang nucleosynthesis. Specifically, it is determining to resolve the abundance of the primordial ${}^7\text{Li}$ in the universe.

We have studied the cross section of this reaction at medium energies using two different experimental techniques. The first experiment was performed at the Centro de Microanálisis de Materiales (CMAM) in Madrid with the *Activation Technique*, where the ${}^7\text{Be}$ recoils were deposited in copper catchers. The reaction cross section is estimated subsequently by detecting the delayed α g from the ions in the catcher (M. Carmona-Gallardo et al. PRC 86, 032801(R) (2012)). The results resolve the discrepancies between the previous measurements and corroborate the first ab-initio calculations by T. Neff (T. Neff, Phys. Rev. Lett. 106, 042502 (2011)).

In the second experiment we, in collaboration with Univ. of York and TRIUMF, used the *${}^7\text{Be}$ Direct Detection Technique*. In this case, the cross section is obtained from the direct counting of the ${}^7\text{Be}$ recoils. The experiment was carried out using the DRAGON spectrometer at TRIUMF. DRAGON is a mass separator with magnetic and electric dipoles that allows separating the recoils of interest (${}^7\text{Be}$) from the unreacted beam (${}^4\text{He}$) before being detected in a Double Sided Si-strip Detector (DSSD) placed at the focal plane of the separator.

Additionally, some measurements were required in order to extract the overall cross section. Firstly, due to the separator is set to detect just one charge state of ${}^7\text{Be}$ recoil, the charge state distribution of Be ions through the ${}^3\text{He}$ gas target had to be studied. Secondly, the gas target density profile had to be determined experimentally by using the ${}^3\text{He}({}^{12}\text{C},p\gamma){}^{14}\text{N}$ resonance reaction. Finally, the recoil angular distribution is higher than the geometrical acceptance of the separator. Therefore, the transmission of the recoils throughout DRAGON was studied by reproducing the experimental conditions with the GEANT3-DRAGON simulation code. These experimental measurements together with the simulations have allowed us to determine the cross section of this reaction at four medium energies.

The study of the cross section for this nuclear reaction has been the thesis topic of Mariano Carmona Gallardo entitled “**Experimental studies of the nuclear reaction of astrophysical interest $^3\text{He}(\alpha,\gamma)^7\text{Be}$** ”, which he defended in July 2014 at the University of Complutense.

STUDY OF THE DIPOLE POLARIZABILITY OF LIGHT NUCLEI

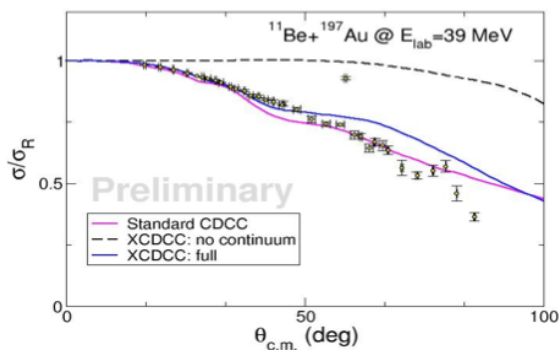
One of the most important and unexpected discoveries in recent Nuclear Physics has been the existence of a neutron halo in some nuclei close to the border of stability (the n drip-line). The halo-state is a consequence of a threshold-phenomena resulting from the closeness of bound states to the continuum. The combination of a small binding energy along with the short-range nuclear forces allows the nucleon (or cluster/group of nucleons) extend and have a non-negligible probability to distances far greater than the normal nuclear RADIUS increasing its polarizability.

The parameter of polarizability is a fundamental property of the nucleus and is a measure of its response to an external electric field. In the adiabatic limit (which corresponds to high excitation energies), the elastic scattering cross section deviates from the prediction of the Rutherford formula proportional to the intensity of the dipole polarizability. Therefore, when measuring the effective cross section for elastic scattering of a core against a heavy target at energies close to the barrera coulombiana, one can determine the polarizability of the nucleus. We have this year completed the analysis of the experiment S1202 studying the one neutron halo nucleus ^{11}Be , the progress is explained in the continuation.

EXPERIMENT S1202: EXPLORING HALO EFFECTS IN THE SCATTERING OF ^{11}Be ON HEAVY TARGETS

(Project FPA2012-32443 (Predoc on contract, Vicente Pesudo, Angel Perea, Olof Tengblad)

During 2014 an intensive research activity in order to finish the analysis of this experiment (S1202) has taken place. On the same time we have participated and put our experimental set-up available to the group of Prof. F. Sarazin of the Colorado School of Mines for the experiment S1429 at TRIUMF, where the $^{11}\text{Be} (^9\text{Be}, ^8\text{Be}) ^{12}\text{Be}$ reaction was studied. Vicente Pesudo is finishing the analysis of the $^{11}\text{Be} (^{197}\text{Au}, ^{197}\text{Au}) ^{10}\text{Be}+n$ reaction at energies around and below the Coulomb barrier, he has been able to extract valuable experimental data in all the angular range from 13° to 150° .



Continuum Discretised Coupled Channel (CDCC) calculations have been performed that matches the experimental data in all the angular range and show the limitations of the two-inert-body model for describing ^{11}Be .

Part of these data was presented at the NS2014 conference in Vancouver Canada <https://indico.triumf.ca/conferenceOtherViews.py?view=standard&confId=1748> and an article with a complete overview of the reaction is being prepared for submission. Further Vicente Pesudo has participated in one national and three international meetings in which he exposed the obtained results and he obtained a very rewarding and fruitful feedback that will be included in the thesis built on this work. The thesis is presently being drafted and is to be defended before summer 2015.

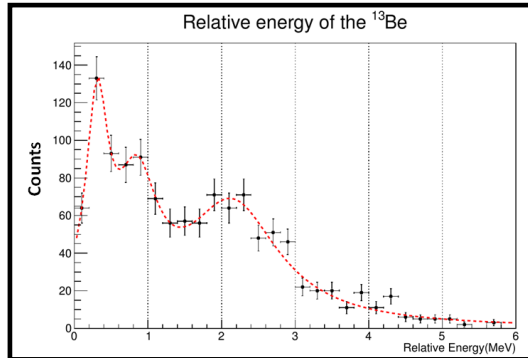
EXPERIMENT S393 R3B@GSI: STUDY OF NEUTRON RICH NUCLEI BEYOND THE DRIP-LINE.

(Project FPA2012-32443, PhD student FPI2010 G. Ribeiro, Olof Tengblad)

Within the international collaboration R3B, we have been studying nucleon transfer reactions using radioactive beams accelerated to energies of 490 MeV/u and let to impinge on a proton target (CH_2), producing a cocktail of exotic light nuclei. The PhD thesis of G.Ribeiro is focused on the analysis of this experiment, in particular on the case of nuclei beyond the neutron drip-line. During 2014 he has been completing the analysis of the unbound nucleus ^{13}Be , which is produced in the reaction of a carefully selected incoming beam of ^{14}B on the proton target. In these kind of nuclear structure physics experiments the technique of complete kinematic is being used, which means that all the energy, time and position parameters are determined for the incoming beam as well as for the scattered fragments after the target, in order to fully detect the energy and momentum conservation in the reaction. To guarantee the detection of nuclei beyond the neutron drip-line, resonances like the ^{13}Be , this technique is absolutely needed, as the half-lives involved are

so short that direct detection is not possible, and we have to reconstruct these components from the signals left by their decay products and use the energy and momentum conservation.

The study of this kind of nucleus gives information about the exotic phenomena that appear at the borders of the nuclei chart, like the unbound states, halos and new magic numbers. The analysis of the nuclear structure has been finished and G. Ribeiro is currently writing the thesis in order to defend this year. He has spent effort explaining the methods and the previous results in different conferences and workshop through the year, as a result three papers are currently awaiting publication in conference proceedings.



Relative Energy Spectrum between the ^{12}Be fragment and the emitted neutron. This histogram allows us to extract information about the different states fed in the reaction.

IS577 EXPERIMENT: NUCLEAR STRUCTURE STUDY OF ^{31}Ar AT ISOLDE

(Project: FPA2012-32443, PhD student FPI2013 Irene Marroquín, Angel Perea, Enrique Nácher)

In the beta decay of exotic nuclei, far from stability, the daughter nuclei might be formed in an excited state, which is unstable against particle emission. This phenomenon is called β -delayed particle emission and is due to a high Q-value and low separation energy for particle emission.

The decay of the proton drip-line nucleus ^{31}Ar is one of the most exotic β -delayed multi-particle decays. It has a large $Q\beta$ -window and as a consequence many different β -delayed decay channels are open: $\beta\gamma$, βp , $\beta p\gamma$, $\beta^2 p$, $\beta^2 p\gamma$, $\beta^3 p$ and perhaps also $\beta^3 p\gamma$.

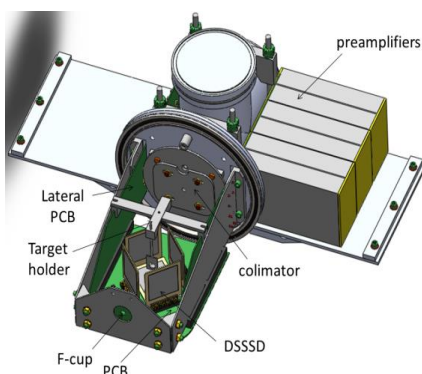
The aim of the IS577 experiment performed last October at ISOLDE using the decay station (IDS) was the identification of the $\beta^3 p$ -decays in ^{31}Ar as well as to provide important information on the resonances of ^{30}S and ^{29}P .

The IDS is a new permanent station, devoted to beta decay measurements at ISOLDE. The IEM group has developed and installed at IDS a new detection chamber; the *MAGISOL Si-Plugin Chamber* consisting in 5 Double Sided Si Strip Detectors (DSSD) in ΔE -E telescope configuration in order to perform simultaneous multi-particle detection in these decay experiments. The set-up is especially compact with high efficiency for multi-particle emission detection and with low cut-off energy. Further, the IDS station includes 4 HPGe clover-detectors surrounding the chamber for high gamma ray detection efficiency.

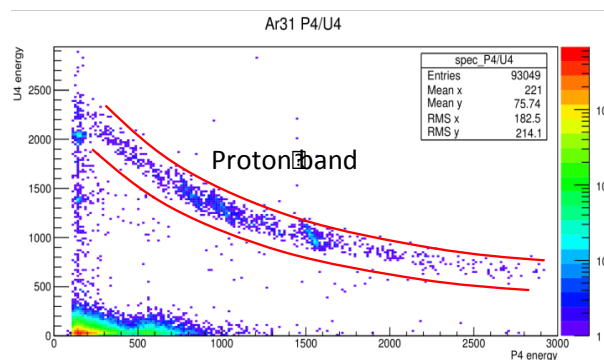
The experiment on the beta decay of ^{31}Ar was carried out under the umbrella of the international collaboration MAGISOL (Madrid-Aarhus-Gothenburg-ISOLDE). The IEM group shares equipment and students regularly with both the Subatomic Physics group, Aarhus University (Denmark) and the Subatomic Physics Division, Fundamental Physics, Chalmers University of technology (Sweden).

The PhD thesis of Irene Marroquín is focused on the preparation, participation and analysis of this experiment.

MAGISOL Si-Plugin Chamber



Configuración telescopio ΔE -E: identificación de partículas



INSTRUMENTATION FOR FAIR: ADVANCES IN THE DETECTION OF HIGH ENERGY PROTONS IN R3B

(Proyect GANAS: ERANET NupNET PRI-PIMNUP-2011-1333 (E. Nácher, O. Tengblad, A. Perea, Alejandro Garzón, José Sánchez del Río))

In the group we work on the design, simulation and construction of a calorimeter for gamma radiation and protons that will be installed in the R3B experiment at FAIR. The front of this calorimeter will receive radiation and charged particles of very high energy since the reaction products in nuclear reactions at relativistic energies mainly are emitted in the forward direction. This front, Forward Endcap, is the responsibility of our group. The R&D of the IEM group has led to the construction of a prototype CEPA4 that consists of 4 individual scintillation detectors, each consisting of two crystals: LaBr3 and LaCl3 coupled optically. In March 2013 the response of CEPA4 to high energy protons (70 - 230 MeV in steps of 10 MeV) was tested using the cyclotron in Kracow. These data have been fully analysed during 2014 and the article "Proton response of CEPA4: A novel LaBr3(Ce)-LaCl3(Ce) phoswich array for high-energy gamma and proton spectroscopy" [Nuclear Instruments & Methods A769,105-111,\(2015\)](#), was published in January 2015.

To obtain an efficient readout system of the scintillators the IEM group is making R&D y characterization of different Digitizers: testing different Digital Pulse Processing & Pulse Shape Discrimination (DPP-PSD) firmware upload into the FPGA. One interesting way has been the design of a specifically Data Acquisition Software based on NI LabView to implement Digital Pulse Processing – Pulse Shape Discrimination (DPP-PSD) using the Caen V1742 ADC. This specifically designed software can calculate important parameters such as rise/fall time, peak, total energy and tail energy of the signals digitized by this ADC. Indeed, it could be possible to discriminate between different kinds of particles detected by the phoswich scintillator detector. By the use of different gamma sources (60Co / 22Na / 137Cs) and the CEPA4 prototype whose temporal signals has been digitized by the Caen DT5730 digitizer as well as with the V1742 ADC, it was possible to setup the software parameters to get energy histograms (calculating the peak energy resolution of the sources) and also pulse shape discrimination (2D

Further R&D and characterization of a LAPD (Large Area Photo Diodes) system has been done. A light and temperature isolated box is being build out in order to test the LAPDs gain as a function of the ambient temperature, this in order to be able to perform acceptance control of delivered LAPDs.

DECAY SPECTROSCOPY WITHIN THE EURICA PROJECT AT RIKEN (JAPAN)

(Proyecto FPA2011-29854-C04-01, Andrea Jungclaus, Jan Taprogge)

In 2012 a decay spectroscopy experiment was performed by our group at the RIKEN Nishina Center within the EURICA Project. A ^{238}U primary beam was used to produce very neutron-rich nuclei around the doubly-magic ^{132}Sn . Those nuclei were then implanted in the active stopper WAS3ABi, an array of double-sided-silicon-strip detectors, which is surrounded by the EURICA Germanium array to observe γ rays emitted in delayed coincidence with the implantation or β decay of those exotic nuclei. The PhD thesis of Jan Taprogge is focused on the identification of μs and ms isomeric states in the neutron-rich Cadmium isotopes with masses $A=128-133$ and the study of the β decays of these nuclei.

In 2014 the first results of this work were published in two letters (J. Taprogge et al., Physical Review Letters 112, 132501 (2014) and Physics Letters B738, 223 (2014)). Furthermore the Gross properties such as β -decay half-lives and β -delayed neutron emission probabilities were studied in detail. For the half-live analysis different methods were used, including the development of an analysis code for Maximum-Likelihood estimation for cases with very limited statistics. In that way half-lives of the β -decaying states up to ^{134}Cd could be deduced. The half-lives of nuclei around the $N=82$ shell closure are crucial input parameters for r-process calculations, because the final abundances are particular sensitive to those half-lives. Furthermore, the β decay of ^{129}Cd was studied and for the first time a very detailed level scheme of the daughter nucleus ^{129}In was established. Moreover, values for the β -decay feeding to states in ^{129}In could be deduced. The β decay of ^{129}Cd to ^{129}In is of particular interest, because the contribution of first forbidden decays in the region $N<82$ close to the doubly-magic ^{132}Sn is still an open question.

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENT WITH EXOTIC THE NEUTRON RICH ION BEAMS AT REX-ISOLDE

(FPA2009-13377-C02-02 y FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Andres Illana, Angel Perea)

The nucleus is a complex quantum system consisting of strongly interacting particles, which displays a great variety of structures and shapes still not fully accounted for by theory. In the case of studying the single-particle properties of the nuclear wave function, magnetic moments provide essential information. Depending on the properties of the state of interest a variety of different techniques has been used for years. In order to study the magnetic moments of radioactive nuclei with excited states characterized by lifetimes in the order of ps, the Transient Field (TF) technique in

combination with Coulomb excitation in inverse kinematics is applied. This technique has successfully been employed for many years to measure magnetic moments with stable beams.

At the end of 2011, our group in collaboration with researchers from other European research institutes carried out the first part of the experiment IS483 at REX-ISOLDE (CERN).

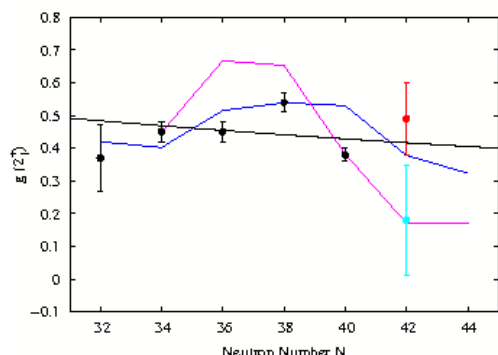


Figure: Comparison between experimental and theoretical g factors for the first excited 2^+ state in even-even Zn isotopes. Previous results are shown as black and light-blue dots, and the present result as a red dot. The lines represent some theoretical calculations for this region.

The aim of this experiment was the measurement of the magnetic moment of the first excited 2^+ state in ^{72}Zn , see figure. The experiment was analysed by A. Illana in the framework of his PhD thesis. On the 18th of June 2014, he defended his thesis at the Faculty of Physics (Complutense University of Madrid). Furthermore, the obtained results were presented in several conferences and have been reported in the proceeding of the INPC2013 (EPJ Web of Conferences 66, 02054 (2014)) and the article Phys. Rev. C 89, 054316 (2014). Finally, an article describing the technique was submitted at the end of 2014 to the journal Nuclear Instruments and Methods A.

INBEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY WITH THE DALI2 SPECTROMETER AT RIKEN (JAPAN)

(Project FPA2011-29854-C04-01 Andrea Jungclaus, Enrique Náchter)

In April 2014 we participated in the experiment NP1306-RIBF31R1 at RIKEN dedicated to the measurement of the reduced transition probability to the first excited 2^+ state, B(E2), in the semi-magic nucleus $^{130}\text{Cd}_{82}$. This experiment, which was performed within an international collaboration lead by our Japanese colleagues, employed Coulomb excitation at relativistic energies and the g-ray spectrometer DALI2. The obtained data are currently under analysis. We hope that the results of this measurement will complete our recent study of the electromagnetic properties of neutron-rich Cd isotopes towards N=82 which we realized during the last years using low-energy Coulomb excitation at REX-ISOLDE.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANO-SCALES

Probably molecular hydrogen (H_2) is the most obvious candidate to replace the fossil fuels 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 nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (air liquid temperature) and a maximum pressure around 50 atmospheres. These are very challenging thermodynamical conditions. Above 33 K molecular hydrogen is in a supercritical state, that is, it is a fluid than cannot be condensed. In other words, the thermodynamic state is such that weak (dispersive) interactions, i.e., interactions comparable to those acting between the molecules themselves so that there is not a breakdown of the chemical molecular bond (chemisorption), it is not possible to retain a substantial quantity of molecules on the adsorbent substrate.

By means of a concurrent use of neutron scattering techniques and adsorption measurement, we have been able to identify novel mechanisms that contribute to a substantial increase of the hydrogen storage capacity of the corresponding substrates, in particular in carbon-based materials.

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).

INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

Within the Project Innpacto IPT-2012-0769-010000, infrared and FT-Raman spectroscopies have been applied to analyze the protein structure and composition of blood plasma. The analyzed samples correspond to 150 patients with Alzheimer's disease (AD) in its initial stage, to patients having frontotemporal dementia and age-matched healthy controls. The spectra treated by multivariate analysis provide classification of samples with sensitivity and specificity higher than 80%. Also, within another project objective related to the development of an automatic system using the 785 nm laser line for AD diagnosis in clinical applications, the said plasma samples have also been measured with a dispersive spectrometer having the 785 nm laser line by searching the optimal recording conditions (excitation power, exposure time and number of accumulations) in order to obtain variation coefficients lower than 10% for the spectroscopic markers between both measurement series.

SPECTROSCOPY IN INFRARED LASER INDUCED ABLATION PLASMAS

The spatio-temporal evolution of the silicon monoxide SiO plasma produced by a high-power CO₂ pulsed laser has been investigated using optical emission spectroscopy (OES) and imaging methods. The formed plasma was found to be strongly ionized, yielding Si⁺, O⁺, Si²⁺, O²⁺ and Si³⁺ species, rich in neutral silicon and oxygen atoms, and very weak molecular bands of SiO. Time integrated and time-resolved two-dimensional OES plasma profiles were recorded as a function of emitted wavelength and distance from the target. The temporal behavior of specific emission lines of Si, Si⁺, O⁺, Si²⁺, and O²⁺ was characterized. The results show a faster decay of O⁺ and Si²⁺ than that of O⁺, Si⁺ and Si. The Stark broadening of isolated single-ionized silicon emission lines was employed for deducing the electron density during the plasma expansion. The relative intensities of two Si²⁺ lines and the Boltzman equation were used to calculate the time evolution of the plasma temperature, ranging between 1 and 3 eV.

The plasma generated by LIBS technique on muscle tissue swine samples has been investigated using a high-power pulsed laser of CO₂. The emission of the plasma shows excited neutral Na, K, Ca, Mg, H, N and O atoms, ionized C⁺, C²⁺, Mg⁺, N⁺ and O⁺ species and molecular band systems of CN(B²Σ⁺ – X²Σ⁺), C₂(d³Π_g – a³Π_u), CH(B²Σ⁺ – X²Π; A²Δ – X²Π), NH(A³Π – X³Σ⁻), OH(A²Σ⁺ – X²Σ⁺), and CaOH(B²Σ⁺ – X²Σ⁺; A²Π – X²Σ⁺). We focus our attention on the dynamics of the swine muscle tissue laser induced plasma species expanding into a vacuum of 0.8 and 0.01 Pa. Time-resolved two-dimensional emission spectroscopy is used to study the expanded distribution of different species ejected during ablation. Spatial and temporal dynamics of different atoms and ionic excited species are reported. Plasma parameters such as electron density and temperature were measured from the spatio-temporal analysis of different species. For some silicon and magnesium species their average velocities in the plasma were estimated.

NANOFABRICATION

The nanofabrication work has continued with the manufacture of nanoparticles (NPs) with metallic plasmonic properties, displaying advanced spectroscopic and catalytical applications. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been also made to develop protocols for the preparation of silver nanostars with tailored morphology, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in SERS, because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. The protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy. On the other hand, hollow Au/Ag nanostar-like NPs were prepared. These new NPs are expected to have interesting properties in the resonance plasmon tuning, allowing shifting this resonance towards the red-near infrared region. This should have interesting applications in the use of these NPs in

hyperthermia and drug delivery. The characterization of these NPs was made by means of TEM, SEM, dark-field microscopy, as well as SERS and SEF.

Moreover, the assembly of NPs was conducted by using bifunctional dithiols (both aliphatic and aromatic ones) and aromatic phenyl diisocyanides with variable lengths. The characterization of these systems has been accomplished by plasmon resonance, TEM, SERS and SEF. The effect of the linker structure on the dimensions of the interparticle cavity was studied on the basis of the linker adsorption, which was realized by an analysis of the coordination and the possible formation of multilayers on the surface.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: FABRICATION OF NANOSENSORS

The functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules was a fundamental work line in our group during 2014. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems.

Functionalization experiments derivatives of the cavitands cyclodextrins and cucurbituril were employed to improve the detection ability of these systems. These linkers possess an internal cavity within which molecules difficult to be detected by SERS can be hosted.

Additionally, in other functionalization experiments of NPs aliphatic aromatic dithiols of different length were also employed. These bifunctional molecules perform a double function: a) the nanoparticle coupling with formation of interparticle junctions where a large intensification of the field occurs, and b) the creation of intermolecular cavities that allow the assembly of analytes. The detection of analytes is then possible because then they are concentrated in the interparticle cavities where a large intensification of the field is achieved. The NPs linking induced by dithiols was also investigated by plasmon resonance and TEM. Functionalized NPs were successfully applied to the detection of organochlorine pesticides like endosulfan, aldrin dieldrin and lindane. In order to do this, an optimization of the linker adsorption was previously made at different experimental conditions (surface coverage, excitation wavelength, metallic substrate), and the sensitivity and selectivity of this detection was tested by analysis of the adsorption isotherms. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of the PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

During the last year it was carried out the functionalization of NPs with diisocyanides and related molecules, in order to implement these systems in catalytic processes of industrial interest and in the molecular detection. This line is being developed in collaboration with researchers at the University of Hokkaido in Sapporo (Japan). These molecules were also used in the characterization of Ag surfaces prepared by pulsed laser deposition by researchers of the Institute of Optics. The latter study implied a previous investigation of the diisocyanide group coordination on the metal surface in order to get more insight on the plasmonic effects undergone by this group.

POLLUTANT DETECTION

During the last year, we have carried out the application of the SERS technique in the detection of pollutants that do not need any surface functionalization. This work was accomplished in collaboration with researches of the Universidade Estadual Paulista (UNESP) in Presidente Prudente (Brazil) and from the Universidad de Málaga (with the latter group we maintain a collaboration through an Associated Unit). We have focused our attention on the pesticide carbendazim, of great importance in agricultural practices in South America. This investigation consisted in the adsorption study on the surface through Raman, IR and plasmon resonance, assisted with the vibrational normal modes analysis with DFT of the corresponding metallic complexes.

BIOMOLECULE/NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility and selectivity to the analytical applications of these systems. Most of these investigations have been performed as a result of the collaboration between our group and researchers at the University of Paris XIII (France) in the frame of an i-LINK project. In fact, it was conducted a study of interaction of therapeutical peptides such as somatostatine, octhreotide and lanreotide with Ag and Au nanoparticles.

Within this line of research, we have concluded the study of the adsorption of proteins (human and bovine albumin and myoglobin, an important protein involved in the transport and storage of oxygen in muscle) on metals. To accomplish this task, different spectroscopic techniques were employed: Raman, SERS, fluorescence, circular dichroism. We have

performed a kinetic study of the denaturation of myoglobin in the adsorption on the metal nanoparticle surfaces and their aggregation. These two processes occur simultaneously and both are dependent on the protein concentration and on the pH conditions. Their knowledge constitutes a principal step in determining the physicochemical conditions for obtaining SERS of the protein. This work was done in collaboration with researchers from the University of Florence (Italy).

During the last year, we continued the research dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques due to their large luminiscence. In this sense, we have carried out a structural and dynamical investigation upon polyphenolic substances extracted from the humic substances and from melanins produced by the digestion processes of fungi. Specifically, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin (soil, leonardite and lignite) on NPs of different morphology, and prepared by means of different protocols developing strategies to increase the intensification of the fluorescence and Raman on metal surfaces. In this regard, it was carried out the functionalization of the surfaces with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. This functionalization process lead to a substantial increase of the SERS signal, due to the fact that these important natural compounds are negatively charged. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy) and the IRNAS-CSIC in Sevilla.

In collaboration with the Department of Biophysics of the University PJ Safarik in Kosice in Slovakia, we are carrying out a study of lichens of the *Xanthoria parietina* species by means of SERS. We have obtained the Raman images showing the pigment distribution in leaves of this lichen.

SURFACE-ENHANCED FLUORESCENCE OF DRUGS ON METAL SURFACES (SEF)

We have progressed in the study of the formation of complexes of various drugs with cucurbituriles. Furthermore, we have started the study of new microscopic complex carrier systems of drugs, based on the inclusion of silver nanoparticles with the drug in the nanopores of a biodegradable and biocompatible synthetic polymer, i. e. PBS. This study was conducted on different size porous structures. The techniques used for characterization in both cases are surface-Enhanced Raman and fluorescence spectroscopy (and SERS SEF). The drugs used in the study were the anti-inflammatory ketorolac, indomethacin and piroxicam and emodin antitumor drugs, which were previously characterized in our group.

In the case of cucurbituriles it was obtained, in cases where it has been possible, the stoichiometry of the complex formation the pH of the binding constant and the molecular species of drug included. Finally, for the inclusion systems of the medicament in the nanoporous polymer, it was carried out an optimization of the preparation conditions giving nanopores with the best infiltration and drug immobilization properties.

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

In 2014 the work on the SERS analysis of mauve dye was completed by studying of the interaction of the different components of that dye with the silver nanoparticles used as SERS supports. To achieve this, the various structures were optimized by using the Gaussian software, and the corresponding Raman spectra were calculated. The analysis of the vibrational normal modes was used to determine the orientation of the molecules on the metallic surface.

A novel method for the preparation of silver nanoparticles by laser irradiation at 442 nm on wool fibres was developed. The employ of this type of metallic substrates is very important for the analysis of artistic pigments and dyes. This is due to the ability to be prepared directly on a specific spot of the material (fibres, in this case) without leaving any mark on it. Irradiation at 442 nm gives rise to more versatile nanoparticles than irradiating at 532 nm. In the first caee, SERS spectra can be obtained at various wavelengths (442, 532 and 785 nm). In the second case, SERS analysis can only be carried out at 532 nm. The optimization of the experimental conditions, such as laser power, irradiation time and silver nitrate concentration was carried out. The prepared nanoparticles were used for the analysis of synthetic dyes on mock and real samples of dyed wool samples. Dyes of different groups, such as triarylmethanes, xanthenes and monoazo were studied. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna, during the stays of several master and Ph.D. students in our department.

In collaboration with the Laser, Nanostructures and Materials Processing of the Instituto de Química-Física Rocasolano the UV laser removal of various varnishes on painting substrates was studied. In particular, optical and Raman microscopies were employed to study physical and chemical modifications of the samples after irradiation at various wavelengths (213 and 266 nm). The employed varnishes were terpenoid resins such as turpentine, copal, dammar, colofonia, sandarac and mastic. Those varnishes were studied both in solvent and in oil. Thus, the analysis were carried out in natural and aged samples by naturally and artificial aging. Raman spectroscopy was used to study the photo-oxidative degradation of varnishes originated by high energy laser irradiation and the related increase of temperature.

The work consisting in the application of Raman spectroscopy and SERS technique to the study of pigments employed in ancient Islamic manuscripts from Morocco was highly advanced. The use of Ag nanoparticles applied on certain areas of coloured inks of the manuscripts and the employ of confocal Raman, allowing an increase of the spatial resolution of the measurements, have revealed the presence of anthraquinone pigments in these manuscripts. We are currently investigating the possible presence of organic pigments by SERS in ink marks of yellow, green and black colours. This work was carried out thanks to collaboration with researchers from the University Moulay Ismail in Meknes (Morocco).

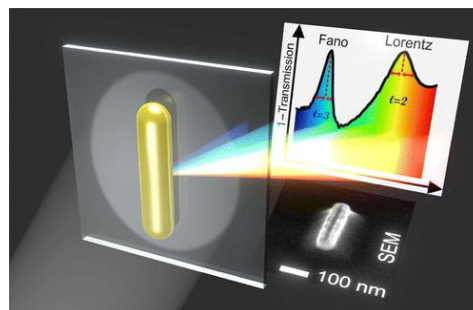
We have continued with the characterization of traditional and commercial organic molecular additives employed in building materials of interest in Historical Heritage. Regarding the commercial additives, they are highly fluorescent organic compounds that are added in low proportions to the cement paste. This makes necessary the employ of the SERS technique for its detection in cement samples.

The use of a portable Raman to detect the existence of conservation treatments (ethylmethacrylate copolymer and an ethyl orthosilicate), both as supplied and after application to limestone was studied in cooperation with the Instituto de Geociencias (CSIC).

Finally, we have also conducted a work is in collaboration with the group of Ablation Plasma Spectroscopy and Photodissociation obtain synthetic glasses in building materials silicon base by applying continuous and pulsed lasers and subsequent identification by laser ablation techniques (LIBS) Raman and Imaging. The results show that irradiating with continuous CO₂ lasers glasses materials are generated, the high temperature (4000-5000K) bearing a changes in the microstructure of the glasses

Semiconductor nanowire photodetection: The absorption of light in semiconductor nanowires has been investigated theoretically and experimentally. Understanding light absorption in nanostructures is crucial to optimize the light-matter interaction at the nanoscale. Semiconductor nanowires have attracted considerable interest as elements to design new efficient photodetectors and photovoltaic devices. These nanowires, due to their small dimensions compared to optical wavelengths, concentrate light and enhance absorption very efficiently, so that can also be used as a nanoantennas capturing light. Measurements show a transition in the mechanism of the absorption depending on the angle of incidence of light, from perpendicular to the nanowire axis to grazing incidence, in agreement with theoretical calculations and numerical simulations. This has been done in collaboration with the group of Dr. Jaime Gómez Rivas FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) and Philips Research Labs (Eindhoven).

Metal nanorods as optical nanoantennas and nanoheaters: In this theoretical and experimental work, carried out in collaboration with researchers at IMEC and Catholic University of Leuven (Belgium), we have investigated the spectral optical response of nanorods, one of the most widely used systems in the study of light-matter interaction at the nanoscale. These metallic structures are typically smaller than the electromagnetic wavelength. Also, its length is much greater than its width. In most cases, nanorods are designed so that the wavelength of interest operates in its fundamental mode (lowest energy), also called half-wave or dipole plasmon resonance. However, this work has yielded valuable information about how these nanorods behave at higher-order modes, demonstrating the existence of interference phenomena of much interest from fundamental (Fano resonances) and applied (sensing) standpoints. On the other hand, this type of metallic nanorods has also been studied with regard to photothermal processes. Absorption in the metal at the dipole resonance induces the heating of the environment, which may be useful in photothermal therapy, upon conveniently tuning the nanorod size to operate within the biological windows; the heating efficiency has been investigated theoretically and experimentally in collaboration with researchers at the UAM and URJC.



2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

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.
- Rotational energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Crystalization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- Energy transfer by molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of interest in atmospheric or combustion processes.
- High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.
- Ultracold Quantum gases.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computacional methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP.
- 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 and Stimulated Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research is divided in the five 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 and several molecular systems (CO_2 , CH_4 , CH_3OH , NH_4^+ , COOH^-), which are some of the main constituents of comet nuclei and interstellar media particles, and studied them using infrared spectroscopy and mass spectrometry. By means of a closed-cycle He cryostat we can extend our experimental range 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.

Astrobiology has become a trendy field of research for the latest years, especially owing to the possible detection of biologically relevant molecules in astrophysical systems (dust, comet nuclei, asteroids...). In our group, we continue with this line, and in 2014 we have completed a study on the carbamate ion, NH_2COO^- , a species that can be formed from the almost ubiquitous CO_2 and NH_3 , both in the presence and absence of H_2O . We have studied the chemical reactions between the precursors deposited at 15 K, and during a warming cycle up to the temperature of water evaporation. Our experimental results are supported by theoretical calculations using CASTEP and Gaussian. One of the main conclusions of this work is the non-detectability of the ammonium ion, NH_4^+ , under certain conditions, whereas the carbamate ion could in principle be observed.

In this same field, we have started a new line of research which promises to open up for us a wide field range of possibilities. We combine therein several of our experimental techniques. In the first place, we generate carbonaceous deposits, the so-called hydrogenated amorphous carbon (HAC), by using the plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) technique. Such samples are admittedly good models for interstellar dust particles, and are therefore interesting in their own merit. But in addition, they can be used as substrates for deposition of other species, and the whole sample can then be irradiated with different sources (UV or X-ray radiation, electrons, protons...), simulating the conditions present in some interstellar clouds. In our first contribution, we have studied the stability of HAC and glycine under bombardment with electrons and irradiation with UV.

In a previously reported work on $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O}$ mixed ices, we could observe the presence in the spectra of the symmetry forbidden ν_1 vibration of CH_4 . We have carried out a theoretical work using different mixtures of CH_4 and H_2O , and

predicting the spectrum of the relaxed structures. We conclude that the ν_1 activation may be due to the interaction between this vibration and an O-H stretch of a nearby water molecule, present in the amorphous sample.

Collaboration with Guillermo Muñoz Caro's group at CAB, has allowed to measure band strengths for the main far-IR bands of H_2O , CO_2 , CH_3OH and NH_3 . Our main contribution to this work lies in the study of theoretical models for the crystals and amorphous solids of these molecules and the prediction of their spectra.

Regarding atmospheric studies, we have established collaboration with Dra Maria Teresa Baeza Romero, from Universidad de Castilla La Mancha in order to study of formation and reactivity of aerosols containing iodinated compounds by experimental and theoretical techniques. This project has been funded by Ministerio de Economía y Competitividad. In 2014, we have started the assembly of the experimental setup in Toledo campus, and we plan to obtain the main results of this project during 2015.

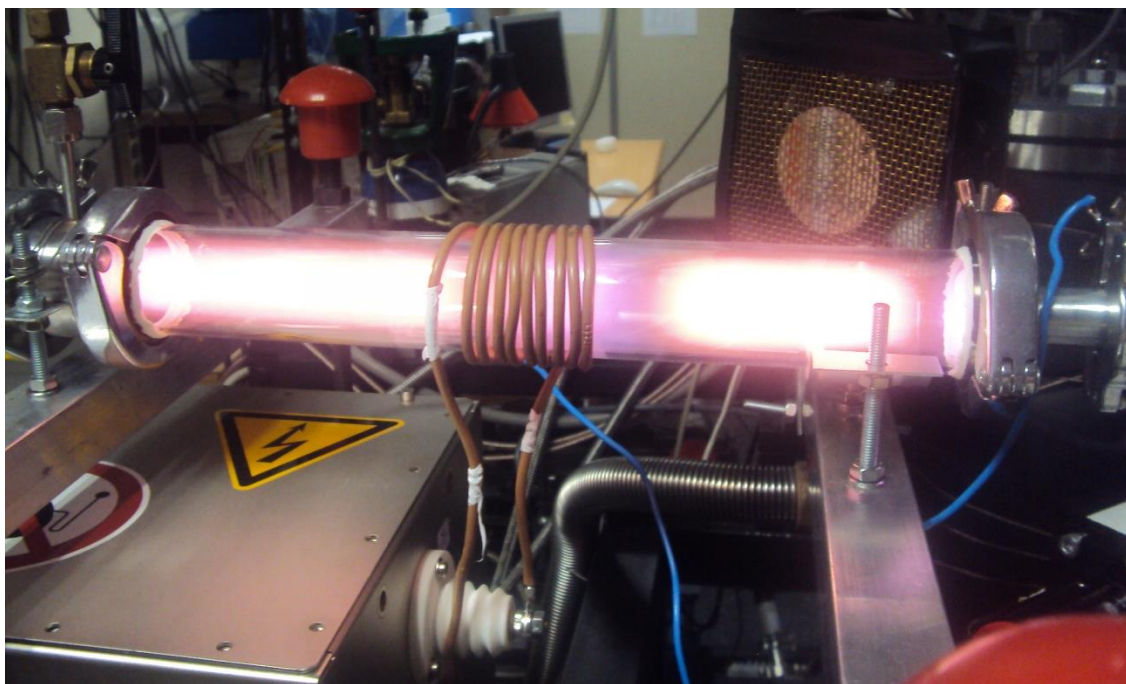
Furthermore, we have started to study in the mid and far infrared regions, spectra of the atmospheric aerosol described as mineral powder, which is basically composed of phyllosilicates such as smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to 50 nm of quartz, feldspar, calcite, iron and aluminum oxides, silicon and also gypsum. In collaboration with Dra. Ana María Fernández (CIEMAT) a series of experiments and theoretical modeling has been done in order to study the palygorskite mineral from Serradilla (Caceres).

In this atmospheric part of our work, we have completed a study on the bonding properties of molecular clusters containing HNO_3 , HOCl and H_2O , present in our atmosphere in diverse concentrations, but which can react and give rise to atmospherically relevant results. This work is in collaboration with researchers of the Universities of Sparta and Karabuk (Turkey), and with Pedro C. Gómez Calzada, of the Complutense University.

Kinetics of cold plasmas and plasma wall interactions

We have continued our research work on the kinetics of cold plasmas of hydrogen rich mixtures with other simple gases. In this way, we have finished an experimental and theoretical study about $\text{H}_2 + \text{Ar}$ plasmas with different pressures and precursors concentration ratios. It has allowed us to unveil the decisive influence of the electron temperature and of some rate coefficients into the concentration ratios of the major ions produced in the discharges: Ar^+ , ArH^+ y H_3^+ . Among these ions, the interest of ArH^+ is worth mentioning because it has been detected recently in space and is the only noble gas compound presently found there.

In the same way, we have studied $\text{H}_2 + \text{O}_2$ plasmas at different gas proportions, characterizing them in the laboratory and developing a kinetic model to investigate the heterogeneous processes that lead to H_2O generation as stable compound and the gas processes leading to the formation of the protonated major ions H_3^+ and H_3O^+ . This model includes negative ions for the first time, as compared with those previously developed by our group for other precursors.



Cold Plasmas Laboratory. Low pressure air plasma, generated in a radiofrequency discharge.

We have studied the formation of amorphous hydrogenated carbon films of astrophysical interest, which we have generated by radiofrequency discharges of He and CH₄ mixtures. Afterwards, we have characterized these films by Fourier transform infrared spectroscopy and have processed them with electron beams at 2 keV and UV radiation, with the aim to investigate structural and composition changes in these films.

The main results of this research can be seen in the papers and presentations to conferences shown below in this Memory.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

We have continued our studies on tunneling and vibrational adiabaticity in the dynamics of elementary reactions using isotopic variants of the MuHH system as a benchmark. We have considered the two channels of the asymmetric D+MuH system. The results of our calculations show that the Mu exchange channel, leading to DMu+H, has a much higher quantal character, with much more structured reaction probabilities and more pronounced tunneling, than the “abstraction” channel producing HD. The system’s asymmetry induces also a selective effect of the rotational excitation of MuH on the reactivity that favours the formation of DMu vs that of HD.

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have developed the study of control of alignment and orientation of isolated polar molecules, using a combination of static electric field and non-resonant intense laser pulses. We have extended the method of adiabatic evolution of Floquet Hamiltonian to the development of a very general method to control rotational excitation-deexcitation while simultaneously controlling the alignment of molecules in initial states with arbitrary quantum numbers J and M.

Ultracold Quantum gases

We have pursued the study of orientation control of interacting dipolar molecules in a tight-binding optical lattice. We have optimized the control of molecular entanglement via a combination of three methods: orientation control at each node via intensity of local laser field, controlled breaking of spatial symmetry using different intensity patterns at adjacent nodes and adiabatic modification of the laser polarization direction to induce controlled quasienergy crossings.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

We have continued the quantitative study of fluid flows out of equilibrium, at the interface between the microscopic description, essentially molecular and quantum, and the macroscopic one, governed by the continuum fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man’s land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods. Supersonic gas jets are a very fruitful research media, where the study of inelastic collisions, the fundamental mechanism of energy transfer between gas molecules, can be afforded. On the other hand, from the experimental point of view, undercooled liquid jets are an ideal medium for studying the homogeneous solidification, free from container wall effects or impurities.

At present, the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics is furnished with two complete instruments for jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twenty years, whose performance and flexibility are unique worldwide. One (A) is adapted to produce gas and liquid jets from cryogenic nozzles, and the other (B) to produce gas jets out of liquid substances from hot nozzles.

In instrument (B) we have refined our previous measurements of Raman spectra in H₂O(g):He jets to take into account the anisotropy of the flow field, which introduces significant errors in points close to the nozzle. Moreover, unlike other systems such as O₂ or N₂ previously studied by our group, we observed that the population of the rotational energy levels of H₂O progressively deviates from the Boltzmann distribution, what prevents us to define a rotational “temperature”, forcing us to work with the individual rotational populations in the analysis of the collisional kinetics. These experiments have been interpreted by using three sets of state-to-state rate coefficients for inelastic H₂O:He collisions, calculated by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics of the Instituto de Física Fundamental CSIC, which works in close collaboration with us. Eventually, a set of “averaged scaled-to-experiment” coefficients have been obtained, able to replicate the experiments within 15% between 20 and 120 K.

With regard to the H₂O:H₂ and H₂O:D₂ inelastic collisions, of great astrophysical interest, it was not possible to determine with enough accuracy the translational temperature of last year experiments with H₂O(g) diluted in *para*-H₂, *normal*-H₂, *ortho*-D₂, and *normal*-D₂, due to the anomalous fluid dynamic properties (bulk viscosity) of H₂. Therefore, we have carried out further measurements by Raman spectroscopy in hydrogen supersonic jets with higher Reynolds numbers, where we have developed a new method to retrieve the translational temperature, which will be translated to the diluted mixtures with H₂O(g).

We have continued the analysis of O₂:He collisions in supersonic jets from the time evolution of the O₂ rotational populations, obtained by Raman spectroscopy. For the interpretation of the experiments we have employed the rate coefficients for inelastic O₂:O₂ collisions obtained in 2011 in our laboratory, along with those for O₂:He calculated by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics of the Instituto de Física Fundamental CSIC. The current analysis confirms that, for temperatures higher than 10 K, the fine structure due to the electron spin of O₂ can be neglected, which greatly simplifies the collisional kinetics.

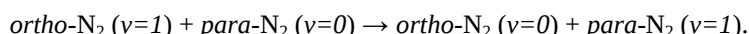
Finally, we have carried out new experiments of Raman spectra of liquid microjets (filaments) of water, in collaboration with the University of Frankfurt (Germany). Water microjets (unlike those of liquid hydrogen previously observed in our laboratory) break into a train of droplets a few microns in diameter, which are cooled in vacuum by surface evaporation, yielding liquid highly undercooled below its melting point, until they eventually solidify. The ultimate goal is to produce this way liquid water cooled below its homogeneous nucleation temperature ($T_H \approx -38$ C), what is known as "no-man's land".

LASER SPECTROSCOPY

Energy transfer by molecular collisions.

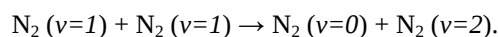
The work carried out throughout 2014 has been fundamentally centered on high resolution spectroscopic studies of the molecule of nitrogen (¹⁴N₂), directed towards both the precise determination of the frequencies of some of its hot bands, which had not yet been observed by high resolution spectroscopy, and the study of its collisional V-V relaxation dynamics (intermolecular vibrational energy transfer). This is a continuation of the work initiated in 2013 and that has been extended to a much broader range of temperatures during the present year.

In our main line of work, the collisional relaxation dynamics studies, we have used the technique of Raman-Raman double resonance to, in a sequential pump-probe experiment, promote population to the $v=1$ vibrationally excited state of the molecule of ¹⁴N₂ and, after a variable delay, probe the evolution of the pumped population and the vibrational relaxation it experiences as a consequence of molecular collisions. The experiment makes use of the existence of two spin varieties, *ortho* and *para*, in N₂: the frequency of the pumping stage is tuned to selectively promote to $v=1$ population belonging only to a single spin variety (we have chosen *ortho*), after which its evolution is monitored together with the emergence of *para* population in that same $v=1$ state. Given that interconversion between the two spin varieties is, for all intents and purposes, forbidden in the time scale of this experiment, the *para* population arriving in $v=1$ can only have reached this state as a consequence of the collisional energy exchange described by



The measurement of the temporal evolution of the relative populations of both nuclear spin varieties allows us to determine the rate of collisional V-V intermolecular energy transfer. The measurements were carried out at 136 K, 226 K and 300 K in order to complement the ones already initiated in 2013, which had been done at 77 K. This has allowed us to get a detailed vision of the efficiency of collisional V-V intramolecular energy transfer in ¹⁴N₂ and its variation with the average kinetic energy of the colliding molecules.

Our second line of work takes advantage of the experimental arrangement set up for the collisional studies we just described: as a consequence of the population pumping to $v=1$ and the subsequent collisions, a small percentage of the population in $v=1$ experiences collisions of the type described by



This type of collision, which is experienced by both spin varieties, has as a consequence that a very small fraction of the total population ends up in $v=2$. Using the same experimental scheme we have already described, and setting a fixed pump-probe delay long enough for the population reaching $v=2$ to be detectable, we have carried out spectroscopic measurements of the second hot band ($v=3 \leftarrow v=2$) of N₂, which up to this day had not been directly observed with a high resolution Raman technique. This will allow us to refine the known values of the rotational constants of a molecule of such relevance in nature as ¹⁴N₂.

Spectroscopic parameters of molecules of interest in atmospheric or combustion processes.

Spectral shapes of isolated lines of HCl perturbed by Ar have been investigated for the first time using classical molecular dynamics simulations (CMDs), in collaboration with H. Tran (Laboratoire interuniversitaire de systèmes atmosphériques). Using reliable intermolecular potentials taken from the literature, these CMDs provide the time evolution of the auto-correlation function of the dipole moment, whose Fourier-Laplace transform leads to the

absorption spectrum. In order to test these calculations, room temperature spectra of various lines in the fundamental band of HCl diluted in Ar are measured, in a large pressure range, with a difference-frequency laser spectrometer. Comparisons between measured and calculated spectra show that the CMDS are able to predict the large Dicke narrowing effect on the shape of HCl lines and to satisfactorily reproduce the shapes of HCl spectra at different pressures and for various rotational quantum numbers.

High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.

We have concluded, in collaboration with other members of the Cold Plasma and Ices group of the department, and of the astrophysics group of CAB-CSIC, the analysis of the vibro-rotational spectrum of $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$ formed in a hollow-cathode electrical discharge, coupled to the difference frequency spectrometer. It must be noted that the most abundant Ar isotope in space is ^{36}Ar , while on Earth most of it is ^{40}Ar and much smaller quantities (0.3% ^{36}Ar and 0.06% ^{38}Ar) are present. Only recently both $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$ have been identified in different H-poor objects in the Galaxy, through Herschel satellite observations. However, now that Herschel is decommissioned, and given the opacity of the Earth atmosphere at the pure rotation frequencies of this molecule, future observations from Earth will rely on infrared observations, either as absorption against bright objects or in emission in high temperature regions. Prior to our study, only 6 and 2 lines of $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$, respectively, had been reported. Our work contributes 19 new measurements with a much higher level of accuracy, and has enabled a new isotope-independent Dunham global fit to all observed transitions and isotopologues of ArH^+ .

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Multiscale simulation of polymeric materials and biological macromolecules.
- 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.
- Biophysics.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidente (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- Raman Spectroscopy.
- Nanoindentation.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion.
- 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 and tetradetection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Simulations using high performance computing.

RESEARCH ACTIVITY:**Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS****POLYMERS FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS: ELECTROSPUN POLYLACTIC ACID INCORPORATING SILVER NANOPARTICLES**

The research collaboration with Dr. Ángel Romo-Urbe (Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM) was initiated a few years ago and has been focused this year in two main research lines. One of these lines was concerned with the development of polymers for biomedical applications. Electrospun non-woven mats of polylactic acid (PLA) and PLA with colloidal silver nanoparticles (AgNPs) were produced under different electrospinning conditions. Such membranes were constituted by fibres of micron-scale diameter and predominant amorphous structure. It was found that the morphology of the PLA mats (density of the beads and average fibre diameter) can be tuned by changing the conditions of electrospinning. The introduction of AgNPs additionally influences the membrane morphology. A remarkable hydrophobic behavior is found for PLA and PLA/AgNP membranes as compared to the PLA solution cast film. This, together with the antimicrobial activity of AgNPs, opens the route for the development of PLA materials for biomedical applications. The appropriate selection of the conditions of electrospinning can allow tuning the hydrophobicity of PLA by means of a control of the mat morphology. In turn, this would not only allow regulating the degradation of PLA via hydrolysis but it is also expected to be helpful in the inhibition of bacteria growth.

INFLUENCE OF RUBBER ON THE CURING KINETICS OF AN EPOXY AMINE SYSTEM AND THE EFFECT ON THE MORPHOLOGY AND HARDNESS OF THE COMPOSITES

In collaboration with Dr. Ángel Romo-Urbe (UNAM), the curing behaviour of an epoxy amine system (diglycidyl ether of bisphenol-A, DGEBA) modified with two different liquid elastomers was investigated by means of shear rheometry. The elastomers were chosen based on either chemical or physical compatibility with the epoxy amine system to hinder phase separation or alternatively reduce the size of the microdomains. One of the modified epoxy resins includes a poly(dimethylsiloxane) (PDMS) diglycidyl ether terminated elastomer (PDMS-DGE) while the other one incorporates a dihydroxy terminated one (PDMS-co-DPS-OH). The aim of the work was to enhance the processing behavior and the mechanical properties of the matrix through the incorporation of tailored elastomers to obtain tougher composites for more demanding applications. It was shown that both elastomers accelerated the curing reaction of DGEBA, especially in the case of the hydroxyl-terminated elastomer. Scanning electron microscopy studies revealed phase separation of the elastomer during the curing reaction except for DGEBA/ PDMS-co-DPS-OH cured at 110 °C, in which the rapid reaction time would not allow for phase separation. Water contact angle tests evidenced either more hydrophilic (ether terminated rubber) or more hydrophobic (dihydroxy terminated rubber) behaviour than the neat epoxy. The latter effect is attributed to the presence of aromatic rings in the backbone structure of PDMS-co-DPS-OH. Indentation measurements showed that the elastomers significantly reduced the hardness of the epoxy resin, the DGEBA/ether terminated composite exhibiting the lowest hardness values. Moreover, it was found that hardness

increased as reaction temperature did, correlating with a reduction of microdomains size thus enabling the tuning of mechanical properties with reaction temperature.

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

NANOESTRUCTURATION OF SOFT CONDENSED MATTER WITH CONTROLLED MORPHOLOGIES

Polymer Nanogratings

We have continued exploiting the possibilities of using lasers to nanostructure the surface of thin polymer films. In cooperation with the group of Drs. M. Castillejo and E. Rebollar (IQFR-CSIC) we have succeeded in the nanofabrication induced by means of nanosecond laser pulses with different polarizations of periodic surface structures (LIPSS) in a series of thin films of poly (ethylene terephthalate) that have demonstrated be useful for controlled growth of mesenchymal stem cells. It has been observed that higher cell proliferation occurs in substrates with higher surface modification, particularly for scaffolds prepared from the circular polarization.

Nanoestructuración by single pulse laser interference lithography

In collaboration with Dr. Jan Siegel of the Institute of Optics (IO-CSIC) we have exploited the phenomenon of single beam interference of two three lasers to nanostructuring of polymer surfaces. By this method were have prepared micro nanogratings as well as a hexagonal network of nano-cavities. This study demonstrates the possibility of single pulse laser interference lithography for the nanofabrication of polymeric structures.

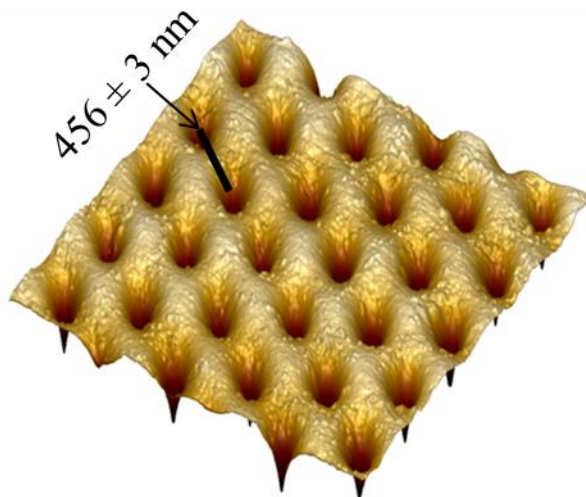


Fig.X. Hexagonal network of nano-cavities in a surface of Poly (propylene terephthalate) prepared by the interference of a single pulse of three lasers.

Polymer Nanowires

In collaboration with the group of Thermoelectrics Materials from the Instituto de Microelectrónica de Madrid, we have continued with the investigation on the structure of poly(3-hexylthiophene) (P3HT) subjected to nanoscale confinement in two dimensions (2D). P3HT nanowires with aspect ratios (length-to-diameter) above 1000 and diameters ranging between 15 nm and 350 nm are produced in the pores of the Anodic Aluminum Oxide templates via two processing routes. These are, namely, drying a solution or cooling from the melt. Our study focuses on the effects of nanoconfinement on the semicrystalline nature of the nanowires, the orientation of crystals, and the evolution of the structures that P3HT might develop under confinement, which we investigate by combining imaging (SEM), spectroscopic (FTIR, photoluminescence) and structural characterization (WAXS, DSC) techniques. Solution-processed P3HT nanowires are essentially amorphous and porous, whereas melt-processed nanowires are semicrystalline, and present a more compact morphology and smoother surfaces. In the latter case, the orientation of crystals was found to strongly depend on the pore diameter. In large diameter nanowires (250 nm and 120 nm), crystals are oriented laying the π - π stacking direction parallel to the nanowire axis. In contrast, in small diameter nanowires, the π - π stacking direction is mainly perpendicular to the nanowires, as crystals are likely to nucleate at pore walls.

Diameter Selection of Carbon Nanotubes in Polymer/SWCNT Nanowire Arrays

In collaboration with Prof. Concepción Domingo, we have investigated the dispersion of SWCNT (single-wall carbon nanotube) in polymer/SWCNT nanowires. Arrays of polymer/SWCNT nanowires supported on a residual nanocomposite film are prepared by melt wetting using porous anodic aluminum oxide (AAO) as a template. The aggregation parameter of SWCNTs extracted from the analysis of their Raman radial breathing modes gives the highest

value for native SWCNTs, indicating that they tend to organize into bundles giving rise to a high degree of aggregation. However, the lowest value achieved at the interface between the nanocomposite film and the nanoarray is explained considering that the forces acting during infiltration are able to disrupt the SWCNT bundles inducing nanotube dispersion. In addition, scanning the nanoarrays along the nanowires length by Raman microscopy has shown a diameter selection of SWCNTs by the AAO membrane. The results reported in this work reveal that it is possible to fabricate arrays of nanowires with homogeneous SWCNT distribution along tens of microns, optimizing nanotube dispersion.

Investigation of the mechanical properties at the nanoscale

We have successfully incorporated to the lab experimental background the quantitative evaluation of mechanical properties (modulus of elasticity, adhesion forces and deformation) of polymeric materials at the nanoscale using the atomic force microscope (AFM) by implementing the technique of “Peak Force Tapping “. In particular we have accomplished a quantitative study of the mechanical properties at the nanoscale of a series of bionanocomposites composed of polylactic acid, natural rubber and various types of clays. The results allowed us to discriminate different levels of compatibility of clays with the other two components.

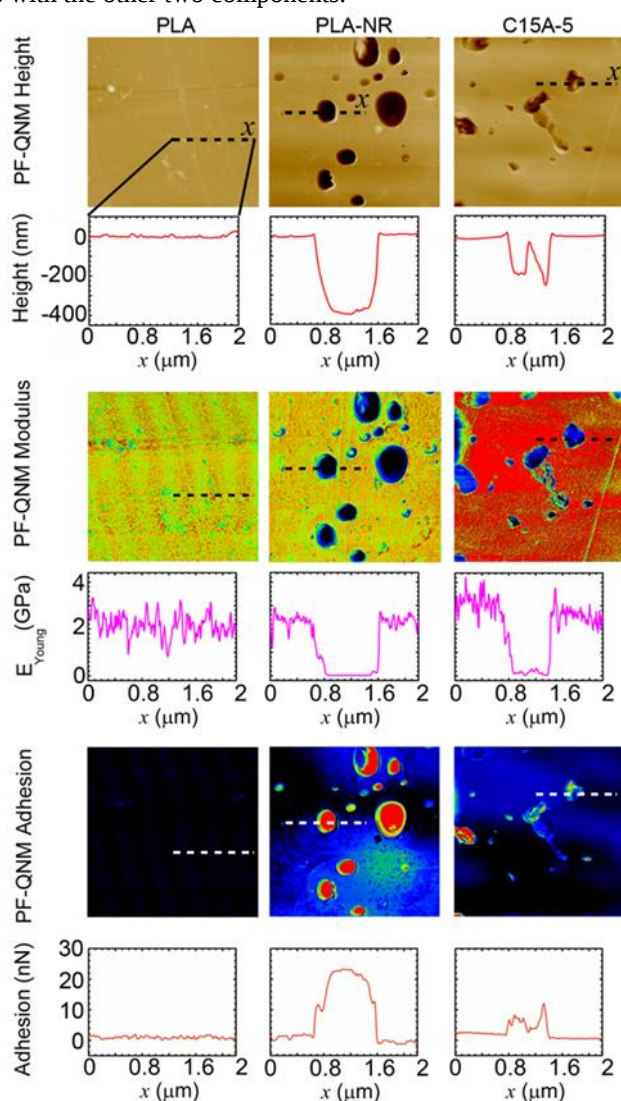


Fig. Y. Images ($5 \times 5 \mu\text{m}^2$) QNM of a series of bionanocomposites made from polylactic acid (PLA), natural rubber (NR) and clay (C15A). From top to bottom: topography, elastic modulus and adhesion force and the associated profiles across the lines indicated in the images.

Investigation of the thermomechanical properties of polymers by microcantilevers

In collaboration with the company MECWINS, we have demonstrated the possibility of using microcantilevers for evaluating the thermal properties of polymers. In particular, we have accomplished a study of the melting of a thin layer of a model polymer deposited on a microlever whose deflection was measured as a function of temperature. The polymer melting could be evaluated by X-ray scattering techniques in grazing conditions and with synchrotron light performed on a single microcantilever.

PHASE SEPARATION IN CONJUGATED POLYMER BLENDS WITH APPLICATION IN ORGANIC SOLAR CELLS

We have investigated conjugated polymer blends of poly-3-hexylthiophene (P3HT) and Poly[N-9'-heptadecanyl-2,7-carbazole-alt-5,5-(4',7'-di-2-thienyl-2',1',3' benzothiadiazole)] (PCDTBT), with application in polymer solar cells (PSCs). The PSCs typically employ a bulk-heterojunction (BHJ) photoactive layer, where an electron-donating (p-type) material and an electron-accepting (n-type) material form a nano-sized phase-separated interpenetrating network, which can provide large enough heterointerface areas for efficient exciton dissociation and a continuous pathway for charge transport.

Composition mapping by Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM)

Thin films of P3HT/PCDTBT blends with different thicknesses have been prepared by spin-coating. The composition has been investigated by Scanning Transmission X-ray Spectro-Microscopy (STXM) which provides an excellent combination of spectroscopy and imaging capabilities with low radiation doses. As a powerful synchrotron-based technique, STXM can quantitatively map the chemical composition of organic films with nanoscale resolution. The STXM images can provide information on the domain sizes, shapes, and purities of thin film polymer blends with a spatial resolution of ~ 20 nm. The composition and thickness maps reveal a structure of thinner P3HT-rich domains enclosed by a thicker PCDTBT-rich matrix.

Nanoscale charge transport by Conductive Atomic Force Microscopy (C-AFM)

C-AFM was used to characterize the electrical properties at the nanoscale of thin films of P3HT/PCDTBT (1:1) blends. Hole current imaging was used to examine conductivity variations and to map the P3HT conducting network in the P3HT/PCDTBT blends. In addition to current imaging with C-AFM, local I-V curves can also be collected. This technique of measuring I-V characteristics by C-AFM is unique because only a very small region of the film, comparable to the tip contact area, is probed. Thus, many areas can be examined, which provide information on the film electrical heterogeneity.

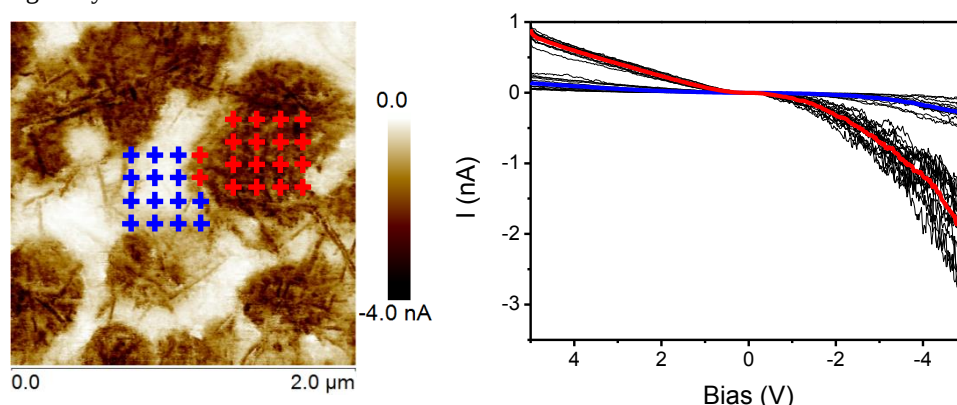


Fig. Z. Contact mode AFM current image (left) of P3HT/PCDTBT blend. Blue and red crosses indicate the positions where I-V curves (right) were measured. Average I-V curves, red and blue for the P3HT rich domain and the PCDTBT rich domain respectively are also included.

DYNAMICS UNDER CONFINEMENT IN SOFT CONDENSED MATTER AND POLYMER

Dynamic confinement in alcohols and polymers

We have studied the phase transformation of ethanol by simultaneously combining techniques of neutron diffraction and dielectric spectroscopy. The results support that a significant reorganization of the network of hydrogen bonds takes place in the subcooled liquid prior to the appearance of the crystalline phase. Within the same topic we continued with the study by dielectric spectroscopy of the crystallization of aromatic polyesters. In particular we investigated the crystallization in real time of poly (pentamethylene terephthalate). Comparison with previous work allowed us to go deeper on the origin and nature of the rigid amorphous phase that appears in most semi-crystalline polymers.

"Jamming" in polymeric materials: photocorrelation spectroscopy X-ray

In collaboration with the group of Prof. C. Mijangos and by using a novel technique as it is X-Ray photocorrelation spectroscopy (XPCS) with synchrotron light we have investigated the dynamics of xerogels, aerogels and their nanocomposites with iron oxide particles. The experiments reveal the existence at room temperature of a slow relaxation process with hyperdiffusive character that we assigned to the motions of the pore walls which exhibits the characteristics of jamming dynamics as that exhibited by systems constituted by particles interacting by short-range repulsive forces.

Dynamics and crystallization in polymer thin films

In collaboration with Dr. Simone Napolitano, from the Université Libre de Bruxelles, we have carried on an study on the role of interphases on dynamics and crystallization of polymers. Confined at the nanoscale level, polymers crystallize much slower than in bulk and in some cases the formation of ordered structures results inhibited for extremely long experimental time scales. The crystallization kinetics was monitored by means of dielectric relaxation spectroscopy, following the reduction in dielectric strength during annealing in isothermal experiments. We exploited a recently developed analytical method assessing the impact of irreversible chain adsorption and permitting to disentangle finite size and interfacial effects. Moreover, we analyzed the thickness dependence of the dielectric strength and obtained the gradient in segmental mobility inside our capped films. We conclude that irreversible adsorption of chains onto the Al electrodes ultimately leads to a reduction in molecular mobility compared to the bulk.

STRUCTURE OF POTENTIAL ANTITUMORAL COMPOUNDS

In collaboration with Prof. F. Díaz from Centro de Investigaciones Biológicas (CIB-CSIC), we have characterized the interaction of taxanes with high activity on chemotherapy resistant tumoural cells with microtubules, and also studied their cellular effects. The biochemical property enhanced in comparison with other taxanes is their potency at inducing tubulin assembly, despite the fact that their interactions with the microtubule binding sites (pore and luminal) are similar as studied by Nuclear Magnetic Resonance and Small Angle X R Scattering

PREPARATION OF POLYMER COMPOSITES CONSTITUTED BY POLY(VINYLDENE FLUORIDE) AND DIFFERENT CARBON-BASED ADDITIVES

Composites constituted by poly(vinylidene fluoride) (PVDF) and different carbon-based additives, such as single wall carbon nanotubes (SWCNT), expanded graphite (EG), carbon nanofibers (CNF) and graphite (G), with different additive concentration, have been prepared. Moreover, the materials have been characterized from a thermal (Differential Scanning Calorimetry, DSC) and structural (Wide Angle X-ray Scattering, WAXS) point of view. Also, their electrical properties have been studied by Dielectric Spectroscopy. It has been concluded: 1°) The carbon-based additives used (regardless of the type) hardly affect the intrinsic thermal properties of PVDF, although they act as nucleating agents for the crystallization process of the polymer matrix; 2°) From WAXS results, it can be assessed that while SWCNT nanocomposites only exhibit the α -crystal phase of PVDF, in the remaining composites, for high additive loading, the β -crystalline phase of the matrix is also observed and 3°) Except for the case of graphite, these composites present both high electrical conductivity and dielectric constant values with low percolation thresholds.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS (BIOPHYM)**SIMULATION OF SYNTHETIC MACROMOLECULAR SYSTEMS**

Polyolefin crystallization in presence of carbon nanotubes. The effect of carbon nanotubes on the physical properties of polyolefin matrices is of great interest for new materials design. At an atomistic level, only simulation can provide information about the structural details of such a compounds. One key aspect determining the physical properties of polyolefinic materials is the own crystallization process. To better understand such processes, a systematic series of atomistic scale simulations on systems containing a polymer chain including branches and a carbon nanotube have been performed. Static and dynamic structural properties of the complex formed by the two macromolecules have been studied. Among other results, the carbon nanotube becomes a nucleant surface for the polyolefin crystallization process.

Ultralong n-alkane crystallization. Ultralong alkanes are ideal models to study the initial steps in polyolefin crystallization processes. On this occasion, fast cooled crystallization processes of ultralong melts are simulated taking also into account different short branch content. The nucleation process is slow down due to the presence of short branches as compared to the linear compounds. In addition to this, even low branch content in the polyolefin macromolecules dramatically affects crystal properties such as crystal width and chain packing. The branch length also affects its inclusion or not in the crystal nuclei resulting in different distortion shapes during crystal formation.

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

The influence of molecular architecture of linear low-density polyethylene (LLDPE) on their melt miscibility with low-density polyethylene (LDPE) was investigated in collaboration with Dow Chemical Ibérica, S.L.. Rheological measurements and data-treatment methods based on mixture models applied to the miscibility problem suggest that the melt morphology of the blends is strongly dependent on the amount of short chain branches. Different LLDPE resins with variable branching content, type of branches and molar mass were blended at a given composition with the same LDPE. The level of short chain branching in LLDPE is revealed as the molecular feature with the strongest influence on melt miscibility with LDPE. The synergistic effect that carbon nanotubes (CNTs) produce on the rheological properties and crystallization of PEs with different branch content and molecular weight was also investigated. Multiwall CNTs

coated with PE (as produced by *in situ* polymerization) were blended in the melt (in a 1% wt. ratio) with different PE matrices of different molecular weights and branch contents. TEM micrographs demonstrated an excellent CNT dispersion in all samples. The rheological and calorimetric properties of the nanocomposites were determined and the results compared to those obtained for neat PE resins. Basic rheological properties increased with the addition of CNTs in all cases. However, the increase was strongly dependent on the molecular weight (and dispersity index) of the matrices regardless of the branch content. A novel screening effect of the CNTs network due to the high relaxation times of the matrix with the highest molecular weight was detected. This important result demonstrates that viscoelasticity can hinder the measurement of the rheological percolation threshold of CNTs network depending on the scale of relaxation times involved. Additionally, it was found that the molecular weight also plays a vital role in CNT nucleation besides chain branching content. Both nonisothermal and isothermal nucleation effects caused by CNTs increased as the molecular weight of the PE matrix decreased in spite of the role played by short chain branches in decelerating their overall crystallization kinetics. The capability for producing more stable lamellae through successive annealing of the nanocomposites as compared to their neat matrices also followed a decreasing trend with molecular weight, as indicated by SSA thermal fractionation results. Nevertheless, the presence of branches played a major role, since fractionation quality improved greatly as the branch content increased in the samples, as expected on the basis of the sensitivity of thermal fractionation to the presence of defects along crystallizable sequences. Concerning structural and morphological aspects, we have performed a study about the crystallization process of model branched copolymers from dilute solution. We have applied differential scanning calorimetry, transmission electron microscopy and X-ray scattering and found a deep effect of branches in the crystallin habits and the thickness of the single crystals. A strong effect of branching in the morphology of single crystals is reported. At constant supercooling, axial and growth face rate ratios increase with short chain branching content. Additionally, a characteristic roughness of the crystal edges emerges, in agreement with the kinetic roughness approach. Micro-diffraction and WAXS results clearly indicate that all samples crystallize in the orthorhombic form. An increase of the unit cell parameters is detected. The changes observed are compatible with a distorted lattice due to the presence of branches at the surface folding. The thickness of the single crystals was determined from shadow measurements by TEM. A decrease in crystal thickness with branching content is observed, in agreement with SAXS results and with calorimetric measurements performed in single crystal mats.

SIMULATION OF MACROMOLECULAR BIOLOGICAL SYSTEMS

Conformational preference of GXG tripeptides. Tripeptides consisting on a central residue flanked by two glycines are frequently used as a model for the study of the denaturated protein structure and the first stages of protein folding. We are conducting a systematic conformational study of these tripeptides using quantum and classical molecular mechanics simulation. The aim is to shed light in the interpretation of the controversial experimental results reported in the literature.

Epithelial Growth Factor Receptors (EGFR). The simulation parameters used for the coarse grained model of the full EGFR complex studied the last year were fine tuned in order to compare with atomistic scale simulations on the same systems. It is particularly relevant than the coarse grained Martini force field used in the simulations results to be compatible with the consideration of Particle Mesh Ewald (PME) protocols for electrostatic interaction calculation. It is noteworthy to mention here than PME is the method supported in the simulation software implemented in GPU technology, which represents a considerable improvement in computational performance. In addition to this, hydrodynamic properties simulation has been carried out on the extracellular ErbB2 receptor and the Trastuzumab monoclonal antibody in order to compare with the experimental data obtained in our own group.

Cellular automaton model for the Chagas disease. This work is concerning to the construction and simulation of a mathematical model to study the evolution of Chagas' disease in a human host. We have generated a model based on the cellular automaton paradigm. This model allows one to make dynamical calculations on a discrete grid representation of the space. Within this model, it is necessary to formulate a number of interaction rules between the agents of the model (parasite and host immune system). The obtained model needs a number of parameters which have to be fixed. Where available, the values of these parameters were fixed to experimental ones found in the literature. For the other parameters, we have used a "trial-and-error" method on a range of values to find the better ones. This model allows one to get results which qualitatively agree with the experimental results. We are going to continue with a refinement and new simulations on this model.

BIOPHYSICS: HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

The study of the structure and biophysical properties of biomacromolecular complexes as proteins leads to a deeper knowledge about their function in their biological context. To this end we have focused our interest in different biological systems: (i) Epithelial Growth Factor Receptors (EGFR or ErbB); (ii) HIV capsid protein complexes (gp proteins); (iii) Virus Like Particles (VLPs); (iv) reflectin and its mutants. These studies were performed in collaboration with other groups, both international (Sino Biological Ltd., Beijing) and national (IQFR/CSIC), specifically in the study of membrane proteins involved in cell signaling processes related to cancer or HIV virus; and proteins responsible for

specific responses to visible light in certain animals (reflectin). We are providing information on their ability to form complexes with antibodies used in cancer therapy such as Trastuzumab (in the case of EGFR proteins); on the flexibility of macromolecular complexes (in the case of membrane glycoproteins of the HIV virus); on the maturation of VLPs used as carriers in gene therapies; and on self-assembly processes for the formation of complex networks (in the case of mutants reflectin).

TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPY at BIOPHYM

The TEM-BIOPHYM facility has been used to analyze systems from scientific laboratories belonging to IQFR, ICTP and IEM (CSIC). The observations were oriented to shed light on the structural details of nanoparticles, nanotubes, nanoclays, polymeric materials and/or nanocomposites. The samples were analyzed as single particles dispersed on the grid surface or as ultrathin sections. Following are listed some of the systems studied: platinum, silver, gold and metal oxide nanoparticles, gold nanoparticles coated with silica and magnetite nanoparticles coated with gold, silver and silica, quantum dots, ultrathin sections of polymeric matrices with different nanoparticles (i.e. titanium, carbon nanotubes, graphene and nanoclays), and micelles and polymeric vesicles. The main purpose of these measurements was to know the nanostructure of the nanoparticles particles or their dispersion and organization into the polymeric matrixes.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

De campos medios a soluciones exactas en sistemas mesoscópicos fuertemente correlacionados.

Code or Reference: FIS2012-34479.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Jorge Dukelsky / *Participation:* R.A. Molina, C. Esebbag, Daniel Huerga.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: The central goal of this project is the development and application of new techniques extending mean field approaches, as well as analytical and numerical exact solutions, to strongly correlated mesoscopic and low dimensional systems.

Quantum Information Technologies in Madrid+ —Participation

Code or Reference: S2013/ICE-2801 (QUITEMAD+)

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

Principal Investigator: Miguel Ángel Martín-Delgado (UCM) / *Participation:* J. Dukelsky, R.A. Molina, J. Mur-Petit.

Duration: October 2014-September 2018.

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

Descripción teórica de estructuras nucleares exóticas y reacciones.

Code or Reference: FIS2011-23565.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Pedro Sarriuren Suquibide.

Duration: January 2012-December 2014.

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

Fundamentos teóricos de la gravedad cuántica de lazos: métodos de teoría de campos y física estadística, álgebra de ligaduras y horizontes cuánticos

Code or Reference: FIS2012-34379

Funding Institution: MINECO.

Principal Investigator: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor (Fernando Barbero is part of the research team).

Duration: January 2013-December 2014 (extended until December 2015).

Objectives: Research in quantum gravity (black holes), quantum field theory and statistical mechanics.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

Code or Reference: FIS2011-30145-C03-02.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: Research in Loop Quantum Cosmology, including inhomogeneities. Investigation of the physical predictions. Quantum Field Theory in curved spacetimes with applications in Cosmology and in Black Hole Physics.

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

Code or Reference: FIS2013-40626-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: January 2014-December 2016.

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

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

Code or Reference: Marie Curie Action FP7-PEOPLE-2012-IRSES.

Funding Institution: European Community (Seventh Framework Programme).

Main Researcher: M. Hochlaf / IP IEM: M.L. Senent.

Duration: 2012-2016.

Objectives: Theoretical study of CO₂ scattering on a liquid-gas interface at the microscopic level.

COST Action CM1002 “Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy”*Code or Reference:* COST Action CM1002.*Main Researcher:* Vincenzo Barone (University of Pisa, Italy) / IP IEM: M.L. Senent.*Duration:* 2010-2014.*Objectives:* It is an interdisciplinary COST Action which aims is creating a network dedicated to computational spectroscopy, i.e. to the extraction of structural and dynamical features of molecular and supramolecular systems by in silico analysis of spectroscopic observables.**Cosmología de Modelos de Gravedad Cuántica.***Code or Reference:* i-Link0484.*Funding Institution:* CSIC.*Main Researcher:* Gianluca Calcagni.*Duration:* January 2013-December 2014.*Objectives:* Extract physically falsifiable predictions of models of quantum gravity when applied to the cosmology of the early (inflationary) and recent (dark energy) universe.**Ion Traps for Tomorrow's Applications —Participation***Code or Reference:* COST Action MP1001 IOTA.*Funding Institution:* COST Office, European Science Foundation.*Principal Investigator:* Martina Knoop (Université d'Aix-Marseille) / Participation: Jordi Mur-Petit.*Duration:* January 2011-December 2014.*Objectives:* Developments in ion-trapping technology. Relevant energy and length scales. Interactions. Cold molecular ions. Hybrid systems.**Common perspectives for cold atoms, semiconductors, and nanoscience —Participation***Code or Reference:* POLATOM.*Funding Institution:* European Science Foundation.*Principal Investigator:* Georgios Kavoulakis, T.E.I (Crete, Greece) / Participation: Jordi Mur-Petit.*Duration:* June 2010-June 2015.*Objectives:* Investigate links between cold atomic physics and semiconductor science. Study technological applications of research on nanoscopic and mesoscopic systems.**Technologies of quantum information with atoms, molecules and circuits —Participation***Code or Reference:* FIS2012-33022.*Funding Institution:* MINECO.*Principal Investigator:* Juan José García Ripoll (IFF-CSIC) / Participation: Jordi Mur-Petit.*Duration:* January 2013-December 2015.*Objectives:* Quantum simulation and detection of topological phases in optical lattices. Quantum simulation with quantum circuits and superconducting metamaterials. Quantum metrology with trapped ions. Quantum spectroscopic protocols for complex ions. Quantum simulation of quantum field theories in curved space-times.**Marie Curie Action "International Outgoing Fellowships for Career Development.***Code or Reference:* FP7-PEOPLE-2011-IOF ELECTROWEAK 298364.*Funding Institution:* European Union (Research Executive Agency under Framework Programme 7).*Principal Investigator:* Óscar Moreno.*Duration:* May 2013- April 2016.*Objectives:* Theoretical description of electroweak processes (beta decays, lepton scattering) in systems bound by the strong interaction.**3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas.***Code or Reference:* FIS2010-15405.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researcher:* Santiago Sánchez Cortés.*Duration:* January 2010-December 2014.*Objectives:* Fabrication, characterization and functionalization of metal Plasmon nanoparticles with advanced properties to be applied in the detection of drugs and biomolecular diagnosis.

Surface-Enhanced Optical Spectroscopy Applied to the Structural Analysis and Detection of Peptides with Therapeutical Interest.

Code or Reference: I-LINK0646.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2013-December 2014.

Objectives: Study of the adsorption of therapeutical peptides on plasmonic nanoparticles aimed at drug delivery.

GANAS Detección de radiación Gamma utilizando Material Centelleo Avanzado y Novedoso.

(<http://www.targisol.csic.es/ganas/>)

Code or Reference: PRI-PIMNUP-2011-1333.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: November 2011-March 2015.

Objectives: R & D for the development of scintillator materials.

Óptica de Transporte de haz y diseño de un imán.

Code or Reference: EIC-CERN-2011-0022.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2012-December 2014.

Objectives: Training of a technician in the international field.

Estudios Experimentales del Núcleo Atómico y I+D para R3B@FAIR.

Code or Reference: FPA2012-32443.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: Nuclear structure studies of drip-line nuclei by experimental methods. Detector and electronic developments for the detection of high energy gammas and protons at FAIR.

Materiales Carbonosos Nanoestructurados para Atrapado y Confinamiento Molecular.

Code or Reference: MAT2012-33633.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: Study of materials and processes relevant for molecular trapping and confinement.

Diseño y construcción de un sistema para el diagnóstico de la Enfermedad de Alzheimer basado en Espectroscopía Raman Laser.

Code or Reference: IPT2012-0769-010000- 20125CP955.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad-FEDER.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2013-April 2015.

Objectives: Design and construction of a system for diagnosis of Alzheimer's disease based on the use of biomarkers detected by Raman spectroscopy.

Espectroscopía gamma de alta resolución: En el camino hacia AGATA.

Code or Reference: FPA2011-29854-C04-01.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Andrea Jungclaus.

Duration: January 2012-December 2014.

Objectives: Nuclear structure studies of drip-line nuclei by experimental methods. Detector and electronic developments for the detection of high energy gammas and protons at FAIR.

Nanoantenas Ópticas Plasmónicas y Semiconductoras (NANOPLAS+).

Code or Reference: FIS2012-31070.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2012-December 2015.

Objectives: To investigate theoretically nanophotonic processes mediated by the excitation of resonances (plasmonic, magnetic, guided/leaky modes) on metallic, semiconductor, and hybrid nanostructures (nanoantennas).

Engineering METamaterials (EMET).*Code or Reference:* CSD2008-00066.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación-Programa Consolider-Ingenio.*Main Researcher:* (Subproyecto CSIC) José A. Sánchez Gil.*Coordinator:* Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).*Duration:* January 2009-June 2014.*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.**Nuevas matrices de cemento elaboradas a partir de cenizas silico-aluminosas procedentes de la activación térmica controlada de estériles de carbón. (Participation).***Code or Reference:* MAT2012-37005-C03-01.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researcher:* Moisés Frias Rojas.*Duration:* January 2013-December 2015.*Objectives:* New materials development with sustainability proposal.**Tecnologías y conservación de materiales del patrimonio. Geomateriales 2.***Code or Reference:* Referencia S2013/MIT-2914*Funding Institution:* Comunidad Autónoma de Madrid (CAM).*Main Researcher:* Rafael Fort.*Duration:* October 2014-October 2018.*Objectives:* To understand geomaterial alteration processes and mechanisms, developing strategies for their protection and conservation by enhancing their resistance to decay and, consequently, their durability.**Caracterización y Control de Nanoestructuras Generadas por Irradiación Láser.***Code or Reference:* CTQ2010-15680 CTQ2010-15680.*Funding Institution:* Ministerio de Ciencia e Innovación.*Main Researcher:* Marta Castillejo Striano.*Duration:* January 2011-December 2013, extension to 2014.*Objectives:* This Project aims at obtaining new knowledge on the physicochemical control mechanisms of micro and nanofabrication of different types of materials using processing techniques based on irradiation and ablation with pulsed lasers in the nanosecond and femtosecond domains.**Controlled Laser Assisted Fabrication of Nanostructures: Laser-Material Interactions and Plasma Processes.***Code or Reference:* CTQ2013-43086.*Funding Institution:* MEYC.*Main Researcher:* Marta Castillejo Striano.*Duration:* January 2014-December 2016.*Objectives:* This Project aims at achieving controlled fabrication of nanomaterials and nanostructures with specific functionalities through the use of direct laser irradiation and laser ablation and deposition. We propose to “guide” the micro and nanofabrication by a better fundamental understanding of the physical-chemistry of the laser-material interactions and by the study of the properties of the plasma produced in the ablation event.**3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****Estudio de sistemas de interés atmosférico y astrofísico mediante espectroscopía láser.***Code or Reference:* FIS2012-38175*Funding Institution:* Ministerio de Economía y Competitividad.*Main Researcher:* Dionisio Bermejo Plaza.*Duration:* January 2013-December 2015.*Objectives:* To employ the high resolution and high sensitivity laser spectroscopy techniques that we have set up in our laboratories to study gas-phase molecular systems that are relevant in atmospheric, planetologic or astrophysical studies. The goal of this research is to obtain spectroscopic parameters that are of use in the interpretation of current observing missions, and to verify formalisms that foster the knowledge of molecular collisions physics.**Fenómenos Coherentes En Gases De Moléculas Dipolares Ultrafrías.***Code or Reference:* FIS2010-18799*Funding Institution:* MICINN.*Main Researcher:* Julio Santos Gómez.

Duration: January 2011-June 2015.

Objectives: Theoretical study of the simultaneous control of rotational and translational degrees of freedom of ultracold dipolar molecules, using static and time-dependent electromagnetic fields.

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

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

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS.

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla

Main Researcher: (IEM-CSIC) Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

Duration: August 2014-July 2020.

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

Hielos y plasmas de interés atmosférico y astrofísico: Simulaciones experimentales y teóricas.

Code or Reference: FIS2010-16455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Víctor J. Herrero.

Duration: January 2011- December 2014.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of ices of astrophysical and atmospheric interest, in particular “dirty ices”, ionic species, and atmospheric ice nucleation and halogen surface reactions; plasmas.

Modelos experimentales y teóricos para sistemas astrofísicos y atmosféricos

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro.

Duration: January 2014- December 2016.

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

Molecular Astrophysics: The Herschel and ALMA Era.

Code or Reference: CSD2009-00038.

Funding Institution: MICINN. CONSOLIDER-INGENIO 2010 Program.

Main Researcher: (IEM-CSIC) Salvador Montero Martín.

Coordinator: José Cernicharo Quintanilla.

Duration: January 2010-December 2014.

Objectives: Several key topics in the areas of molecular complexity in space and in the chemistry of regions of star and planet formation: water in the universe, carbon chemistry, deuterium, chemical complexity, ionization and photodissociation, oxygen and nitrogen chemistry, molecular tracers of shocks, interstellar dust grain chemistry.

Detecting the noble gas molecules HeH^+ and ArH^+ in the Crab Nebula with CRIRES

Code or Reference: ESO Proposal: 292.D-5027

Funding Institution: European Organisation for Astronomical Research in the Southern Hemisphere 2014.

Main Researcher: Mikel J. Barlow (University College London UK)

(IEM Participants: José L. Doménech, Maite Cueto, Isabel Tanarro and Víctor J. Herrero)

Duration: January 2014.

Objectives: Detection of the noble gas protonated ions HeH^+ and ArH^+ with the infrared telescope CRIRES, at the European Southern Observatory.

Estudio teórico-experimental de colisiones moleculares y condensación: de la fase gas a microchorros de hidrógeno líquido.

Code or Reference: FIS2010-22064-C02.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2011- December 2014.

Objectives: State-to-state rate coefficients for inelastic collisions of CO and O₂ at low temperature, homogeneous clustering of O₂, and search for supefluidity in highly undercooled liquid microjets of para-H₂.

Thunderstorm effects on the atmosphere-ionosphere system.

Code or Reference: TEA-IS, (09-RNP-101)

Funding Institution: ESF Research Networking Programme.

Main Researchers: Torsten Neubert and Francisco J. Gordillo-Vázquez.

(IEM Participants: Isabel Tanarro and Víctor J. Herrero).

Duration: 9 May 2011-9 May 2016.

Objectives: Theoretical, laboratory and field studies of surprising phenomena observed above thunderstorms in the last twenty years: huge electric discharges in the stratosphere and mesosphere, and energetic bursts of gamma-radiation, which can improve the present knowledge of thunderstorms and affect the stratospheric and low ionospheric chemistry.

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

Code or Reference: FIS2013-48275-C2.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guzmán Tejeda Gala and Salvador Montero Martín.

Duration: January 2014-December 2016.

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

Microscopic investigations of CO₂ capture and scattering on liquid gas interface

Code or Reference: PIRSES-GA-2012

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

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

(IEM Participants: Vicente Timón).

Duration: 1 Oct 2012-30 Oct 2016.

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

Estudio de procesos atmosféricos del yodo con implicaciones climáticas

Code or Reference: CGL2013-48415-C2-1-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Óscar Gálvez González.

Duration: January 2014- November 2015.

Objectives: Laboratory and theoretical investigation of aerosols of atmospheric interest containing iodinated compounds. We will determine the reactivity of this kind of aerosols with a series of atmospheric pollutants and its interaction with light.

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Nanofabricación de Estructuras Poliméricas con Morfología Controlada: de las bases Físicas a las Aplicaciones.

Code or Reference: MAT2012-33517.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: To advance in the general understanding of the underlying physics involved in the integration of polymer nanotechnology in the production at nanoscale of functional nanomaterials and devices.

Aproximación dinámica al estudio de procesos de generación de nanoestructuras y transferencia de información en sistemas macromoleculares

Code or Reference: MAT2012-36341

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: January 2013-December 2015.

Objectives: This project of basic character, but with undoubted repercussions of application in the field of the synthetic and biological macromolecules, approaches on the one hand, the processes of formation of nanostructure in polyolefinic systems in which diverse macromolecular architectures are involved and, for other one, the transfer of chemical information at the interface defined by the cell membrane.

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

Code or Reference: PIE201360E097

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: January 2014-December 2015.

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

Viscoelastic properties of nanostructural polymer systems by means of depth sensing nanoindentation.

Code or Reference: FIS2010-18069

Funding Institution: MCIIN.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Duration: January 2011-September 2014.

Objectives: The study of finite size effects on the physical properties of nanostructural polymer systems such as: thin films, polymer composites and copolymers. The micromechanical properties derived from nanoindentation will be compared to the values associated to the bulk.

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

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

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Araceli Flores Aguilar-Amat.

Duration: January 2014-December 2016.

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

Nanoestructuración de polímeros y sistemas híbridos: Una vía sinérgica hacia la multifuncionalidad.

Code or Reference: MAT2011-23455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Mari Cruz García-Gutiérrez.

Duration: January 2012-December 2014.

Objectives: The purpose of the project is to study physical processes such as rewetting, crystallization, self-assembly, directional-assembly or molecular dynamics, which undergo in polymer systems or polymer composites under spatial confinement. The final objective is to be able to tune the intrinsic morphology of those systems in order to optimize their applications in optoelectronic devices.

Design and application of structure-property relationship methods to the functionality study of macromolecular model materials.

Code or Reference: RYC-2011-09585.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: January 2012-December 2016.

Objectives: Development and implementation of computer codes to study multiscale properties in macromolecules.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES / CONGRESSES AND MEETINGS

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

FQXi – The Physics of Information (*International non-UE congress*), Vieques (Puerto Rico), 5th-10th of January 2014.

- *Horizon Entropy. Quasi Black Holes* (Oral contribution), Luis J. Garay.

ATHENA Brussels Workshop on Astrophysics (*International UE congress*), Brussels (Belgium), 27th-28th of January 2014.

- *Weak-decay rates in stellar scenarios from QRPA calculations* (Oral contribution), Pedro Sarriguren.

6th Madrid Cold Atoms Meeting (*Local congress*), IFT-CSIC, Madrid (Spain), 31st of January 2014.

- *Measurement and control of polar molecules using trapped atomic ions* (Invited talk), Jordi Mur-Petit and J.J. Garcia-Ripoll.

2nd EFI Winter Conference on Canonical and Covariant LQG (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 10th-14th of February 2014.

- *Uniqueness of the Fock Quantization and Signature Change in Cosmology* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán and Laura Castelló Gomar.

Nuclear Structure & Reactions: Experimental and Ab Initio Theoretical Perspectives (*International non-UE congress*), Vancouver (Canada), 18th-21st of February 2014.

- *1+N reactions with integral relations: Applications with the adiabatic expansion method* (Invited talk), E. Garrido.

APS March Meeting 2014 (*International non-UE congress*), Denver (USA), 3rd-7th of March 2014.

- *Magnetic and Kohn-Luttinger instabilities near a Van Hove singularity: monolayer versus twisted bilayer graphene* (Oral contribution), José González.

Quantum Gravity and Fundamental Cosmology 2014 (*International non-UE congress*), Golm (Germany), 3rd-6th of March 2014.

- *Cosmology of multiscale spacetimes* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

7th Workshop on Shape-Phase Transitions and Critical Point Phenomena in Nuclei (*International non-EU congress*), Sevilla (Spain) 10th-13th of March 2014.

- *Phase diagram of the 2D Bose-Hubbard model: Goldstone and Higgs* (Invited talk), Jorge Dukelsky.

DPG-Frühjahrstagung der Sektion AMOP (*International non-EU congress*), Berlin (Germany), 17th-21st of March 2014.

- *Quantum simulation of nuclear matter with ultracold molecules* (Oral contribution), Jordi Mur-Petit.

6th Jerte Advanced Relativity Meeting (*Local congress*), Navaconcejo (Spain), 7th-10th of April 2014.

- *The Quantum Echo of the Early Universe* (Oral contribution), Ana Blasco, Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito and Eduardo Martín-Martínez.
- *Effective Dynamics of Perturbations in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Mikel Fernández-Méndez, Guillermo A. Mena Marugán and Javier Olmedo.
- *Mimicking Matter in the Hybrid Quantum Gowdy Models* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués, Mercedes Martín-Benito and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Uniqueness of the Fock Quantization and Signature Change in Cosmology* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Quantum Correlations across Cosmological Horizons* (Oral contribution), Ana Alonso-Serrano, Luis J. Garay and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Cosmology of Multiscale Spacetimes* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

Fourth Conference on Nuclei and Mesoscopic Physics (*International non-EU congress*), Michigan (USA) 5th-9th of May 2014.

- *Hierarchical Mean-Field Approach in Frustrated Spin and Lattice Boson Systems* (Invited talk), Jorge Dukelsky.

3rd International Workshop on “State of the Art in Nuclear Cluster Physics” (*International non-UE congress*), Yokohama (Japan), 26th-30th of May 2014.

- *Rotational character of the ^8Be and ^{12}C spectra investigated through inelastic cross sections via photon emission* (Oral contribution), Eduardo Garrido.

Summer School on CO₂ capture: microscopic studies and applications (*UE congress*), Rabat (Marocco) 9th-12th of June 2014.

- *Theoretical spectroscopy* (Invited talk), M^a Luisa Senent.
- *Atmospheric pollutants* (Poster), S. Dalbouha, M^a Luisa Senent and N. Komiha.

Información Cuántica en España (ICE-1) (*International non-EU congress*), Zaragoza (Spain), 25th-27th of June 2014.

- *Quantum sensing with trapped ions* (Oral contribution), Jordi Mur-Petit, A. Cadarso and J.J. Garcia-Ripoll.

TAS Collaboration Workshop: Status and Perspectives (*International UE congress*), Valencia (Spain), 26th-28th of June 2014.

- *Beta-decay properties from deformed QRPA calculations* (Invited talk), Pedro Sarriguren.

1st Conference of the Polish Society on Relativity (*International non-UE congress*), Spala (Poland), 29th of June-4th of July 2014.

- *Uniqueness of the Fock Quantization in Cosmology with Signature Change* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán and Laura Castelló Gomar.

WE-Heraeus-Seminar Quantum Cosmology (*International non-UE congress*), Bad Honnef (Germany), 28th of July-1st of August 2014.

- *Cosmology of multiscale spacetimes* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

9th International Workshop on Disordered Systems (*International non-UE congress*), San Antonio (USA), 18th-22nd of August 2014.

- *Bounded states in the continuum: chiral lattices and Van Hove singularities* (Invited talk), Rafael A. Molina and Jordi Mur Petit.

Experimental Search for Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Trieste (Italy), 1st-5th of September 2014.

- *Echoes of the Early Universe* (Oral contribution), Ana Blasco, Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito and Eduardo Martín-Martínez.

ERE2014 (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 1st-5th of September 2014.

- *Quantum Correlations across Horizons* (Oral contribution), Ana Alonso-Serrano, Luis J. Garay and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Loop quantum cosmology: lessons from the polymerized harmonic oscillator* (Oral contribution), J. Fernando Barbero G., Tomasz Pawłowski and Eduardo J. S. Villaseñor.

Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems II (*International non-EU congress*), Brasov (Romania), 1st-5th of September 2014.

- *Composite particle mapping for boson and fermion lattice systems* (Invited talk), Jorge Dukelsky.

The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (*UE congress*), Bologna (Italy), 2nd-6th of September 2014.

- *Detectable organosulfur compounds* (Contributed talk), M.L. Senent, C. Puzzarini, R. Domínguez-Gómez, M. Carvajal and M. Hochlaf.
- *Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of s-methyl thioformate and o-methyl thioformate* (Poster), R. Domínguez-Gómez, C. Puzzarini, M^a Luisa Senent, M. Hochlaf and M. Carvajal.

SPECMO 2014 : New experimental and theoretical developments in molecular spectroscopy (*UE congress*), Corsica (France), 7th-13th of September 2014.

- *Ab-initio quantum chemical calculations for vibrational and rotational spectroscopy* (Invited talk), M^a Luisa Senent
- *Ab initio spectroscopic studies of non-rigid molecules: ethylene glycol and dimethyl carbonate* (Poster), R. Boussessi, S. Guizani, M^a Luisa Senent and N. Jaïdane.

Quantum Technologies Conference V (*International non-EU congress*), Krakow (Poland), 8th-13th of September 2014.

- *Dynamics of Discrete Quantum Systems* (Invited talk), Jordi Mur-Petit and Rafael A. Molina.

Conceptual and Technical Challenges for Quantum Gravity 2014 (*International non-EU congress*), Rome (Italy), 8th-12th of September 2014.

- *Cosmology and quantum gravities: Where are we?* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

Conference on Cold and Controlled Molecules and Ions (*International non-EU congress*), Ascona (Switzerland), 14th-19th of September 2014.

- *Quantum sensing with trapped ions* (Poster), Jordi Mur-Petit and J. J. Garcia-Ripoll.

2nd i-Link Workshop Macro from Micro (*International non-EU congress*), Madrid (Spain), 15th-18th of September 2014.

- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology: Mukhanov-Sasaki Equations in Different Approaches* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán, Laura Castelló Gomar, Mikel Fernández-Méndez and Javier Olmedo.
- *Cosmology and Quantum Gravities: Where Are We?* (Invited talk), Gianluca Calcagni.
- *Modelling Effective FRW Cosmologies with Perfect Fluids from States of the Hybrid Quantum Gowdy Model* (Invited talk), Mercedes Martín-Benito, Beatriz Elizaga Navascués and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology: Some Numerical Results* (Oral contribution), Mikel Fernández-Méndez, Guillermo A. Mena Marugán and Javier Olmedo.
- *Quantum Cosmology: Games without Frontiers* (Oral contribution), Ana Alonso-Serrano, Luis J. Garay and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Boundary Hilbert Spaces in QFT: A case study* (Invited talk), J. Fernando Barbero G., B. Juárez-Aubry, J. Margalef and E.J.S. Villaseñor.

International School on Nuclear Physics, 36th Course. Nuclei in the Laboratory and in the Cosmos (*International UE congress*), Erice (Italy), 16th-24th of September 2014.

- *QRPA calculations of stellar weak-decay rates* (Invited talk), Pedro Sarriuren.

7th Madrid Meeting on Ultracold atoms (*Local congress*), Madrid (Spain), 17th of October 2014.

- *Bounded states in the continuum: chiral lattices and Van Hove singularities* (Invited talk), Rafael A. Molina, Jordi Mur Petit.
- Conference organizer: Jordi Mur Petit.

CODECS 2014 Workshop (*International UE congress*), Bratislava (Slovakia) 23rd-27th of October 2014.

- Potential energy surfaces and molecular dynamics (Oral contribution), M^a Luisa Senent.

COST IOTA Final Event (*International non-EU congress*), Marseille (France), 6th-7th of November 2014.

- *Quantum technologies with cold polar molecules and molecular ions* (Invited talk), Jordi Mur-Petit.

JGRG24: The 24th Workshop on General Relativity and Gravitation in Japan (*International non-EU congress*), Tokyo (Japan), 10th-14th of November 2014.

- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology: Mukhanov-Sasaki Equations* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán, Laura Castelló Gomar, Mikel Fernández-Méndez and Javier Olmedo.
- *A Unique Fock Quantization for Scalar Fields in Cosmologies with Signature Change* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar and Guillermo A. Mena Marugán.

1st Chilean Gravity Meeting (*International non-EU congress*), Buenos Aires (Argentina), 20th-21st of November 2014.

- *Hybrid Quantization of the Polarized Gowdy T^3 Model with Matter* (Oral contribution), Mercedes Martín-Benito, Daniel Martín-de Blas and Guillermo A. Mena Marugán.

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

2nd Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure (*International UE congress*), Bormio (Italy), 19th-22nd of February 2014.

- *Reactions with Light Nuclei at rex-isolde* (Invited talk), Olof Tengblad.

NUSTAR Annual Meeting (*International non-UE congress*), GSI, Darmstadt (Germany), 3rd-7th of March 2014.

- *First results from the EURICA campaign* (Invited talk), A. Jungclaus.
- *CEPA advances in the new version of R3BRoot* (Oral presentation), José Sánchez del Río Sáez, Enrique Náchter, Ángel Perea and Olof Tengblad.

Nanolight 2014 (*International non-UE congress*), Benasque (Spain), 2nd-8th of March 2014.

- *Exotic optical properties of metal-semiconductor nanostructures: Negative- and zero-index metamaterials and transparent nanocontacts*, (Oral presentation), Ramón Paniagua-Domínguez, Diego R. Abujetas, Fernando López-Tejiera, Luis Froufe-Pérez and José A. Sánchez-Gil.

NanoSpain Conference 2014 (*International UE congress*), Madrid (Spain), 11th-14th of March 2014.

- *Molecular linkage of plasmonic nanoparticles in colloidal suspensions for enhanced pollutant sensing* (Invited Lecture), José V. García-Ramos, Jana Kubackova, Daniel Jancura and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Tailoring the size and shape of a new type of Silver Nanostars with outstanding plasmonic properties* (Poster), Adrianez García-Leis, Irene Rivera, José V. García-Ramos and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Characterization of supramolecular complexes formed between non-steroidal anti-inflammatory drugs and cucurbit[n]urils adsorbed on silver nanoparticles* (Poster), Paz Sevilla, Elisa Corda, Margarita Hernández, José V. García-Ramos and Concepción Domingo. (Together with Molecular Physics Dept.).
- *Wide band transparent metallo-dielectric nanowires at telecommunications wavelengths: more transparent than glass* (Oral presentation), Luis Froufe-Pérez, Ramón Paniagua-Domínguez, Diego R. Abujetas, JJ. Sáenz and José A. Sánchez-Gil.
- *Enhancing and directing light emission in semiconductor nanowires through leaky/guided modes* (Oral presentation), Ramón Paniagua-Domínguez, Grzegorz Grzela, Tommy Barten, Yannik Fontana, Jaime Gómez Rivas and José A. Sánchez-Gil.
- *Study of nanostars as thermoplasmonics nanoparticles by means of the Green-theorem method* (Oral presentation), Rogelio Rodríguez-Oliveros and José A. Sánchez-Gil.
- *Resonant metal-semiconductor nanostructures as building blocks of low-loss negative- and zero-index metamaterials* (Poster), Diego R. Abujetas, Ramón Paniagua-Domínguez, Luis Froufe-Pérez and José A. Sánchez-Gil.

XIX Congreso de Física Estadística (*National congress*), Orense (Spain), 2nd-4th of April 2014.

- *Cristalización de para-hidrógeno: ¿una transición (de primer orden) cuántica a temperatura finita?* (Oral presentation), Carlos Cabrillo, Félix Fernández-Alonso, Ricardo Fernández-Perea, Francisco J. Bermejo, Miguel A. González, Claudia Mondelli and Enmanuel Farhi.

MAGISOL- Meeting ISOLDE (*International UE congress*), Geneva (Switzerland), 28th-29th of April 2014.

- *¹¹Be halo nucleus reaction on heavy targets at energies around the Coulomb barrier* (Oral presentation), Vicente Pesudo.
- *MAGISOL meeting ISOLDE CERN* (Oral presentation), Olof Tengblad.
- *Unbound Beryllium: ¹³Be* (Oral presentation), Guillermo Ribeiro.
- *MAGISOL plug-in Set-up Status* (Oral presentation), Irene Marroquín, Andrés Illana, Ángel Perea and Olof Tengblad.

Conferencia Española de Nanofotónica (*International UE congress*), Madrid (Spain), 14th-16th of May 2014.

- *Controlling light emission, scattering and propagation at the nanoscale with metal, semiconductor and hybrid nanowires* (Oral presentation), Diego R. Abujetas, Ramón Paniagua-Domínguez and José A. Sánchez-Gil.
- *Enhancing and directing light emission in semiconductor nanowires through leaky/guided modes* (Oral presentation), Ramón Paniagua-Domínguez, Grzegorz Grzela, Tommy Barten, Yannik Fontana, Jaime Gómez Rivas and José A. Sánchez-Gil.
- *Resonant metal-semiconductor nanostructures as building blocks of low-loss negative- and zero-index metamaterials* (Poster), Diego R. Abujetas, Ramón Paniagua-Domínguez, Luis Froufe-Pérez and José A. Sánchez-Gil.

5th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'14) (*International non-UE congress*), Singapore (Singapore), 20th-23th of May 2014.

- *Resonant metal-semiconductor nanostructures as building blocks of low-loss negative- and zero-index metamaterials* (Invited Lecture), Ramón Paniagua-Domínguez, Diego R. Abujetas, Luis Froufe-Pérez and José A. Sánchez-Gil.
- *Wide band transparent metallo-dielectric nanowires at telecommunications wavelengths: more transparent than glass* (Invited Lecture), Luis Froufe-Pérez, Diego R. Abujetas, J. Sáenz, Ramón Paniagua-Domínguez, and José A. Sánchez-Gil.

- *Fano- and Lorentz-like Resonances in Plasmonic Nanorods*, (Oral presentation), N. Verellen, Fernando López-Tejeira, Ramón Paniagua-Domínguez, D. Vercruysse, D. Denkova, L. Lagae, P. Van Dorpe, V. V. Moshchalkov and José A. Sánchez-Gil.

2nd Conference on Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS 2014) (*International non-UE congress*), Tokyo (Japan), 1st-6th of June 2014.

- *Constraining the Astrophysical S Factor of the $^4\text{He}(^3\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ Reaction* (Oral presentation), Mariano Carmona-Gallardo, A. Rojas, B.S. Nara Singh, C. Akers, O. Aviv, M^a José G. Borge, G. Christian, B. Davids, J. Fallis, B.R. Fulton, U. Hager, G. Haquin, M. Hass, D.A. Hutcheon, Y. Nier-El, D. Ottewell, C. Ruiz, S.K.L. Sjøe, Olof Tengblad, R. Yaniv and Z. Yungreis.
- *CEPA4: A LaBr₃(Ce)/LaCl₃(Ce) Phoswich prototype array for simultaneous detection of high-energy gamma and proton radiation* (Poster), Olof Tengblad, M^a José G. Borge, Enrique Nácher, Ángel Perea, Guillermo Ribeiro, José Sánchez del Río, Mikael Mårtensson, Thomas Nilsson and Hakan T. Johansson.
- *Beryllium Beyond the Neutron Drip-Line: ^{13}Be* (Poster), Guillermo Ribeiro and Olof Tengblad.
- *Deformation of the N=Z nucleus ^{72}Kr via beta decay* (Oral presentation), José A. Briz, M^a José G. Borge, Olof Tengblad, Alejandro Algara, Enrique Nácher, Belén Rubio, J. L. Tain and W. Gellately.

QIES 2014 - XVI Reunión científica plenaria de Química Inorgánica y X Reunión científica plenaria de Química del Estado Sólido (*National congress*), Almeria (Spain), 15th-18th of June 2014.

- *Absorbate-induced ordering and bilayer formation in Propanol-Graphite Oxide intercalates: a neutron diffraction study in real-time* (Poster), Carlos Cabrillo, Fabienne Barroso-Bujans, Ricardo Fernández-Perea, Félix Fernández-Alonso, Daniel Bowron and Francisco J. Bermejo.

Colloids 2014 - 4th International Colloids Conference (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 15th-18th of June 2014.

- *Bimetallic Nanostars (Ag@Au) with High Surface Enhanced Raman Scattering (SERS) Performance: Detection of β -Amyloid and Its Marker Thioflavin T* (Invited lecture), Adiane García-Leis, José V. García-Ramos and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Gaps induced by molecular linkage of plasmonic nanoparticles in colloidal suspensions for enhanced pesticide sensing* (Poster), José V. García-Ramos, Jana Kubackova, Daniel Jancura and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Fluorescence characterization of drug carrier systems formed by drug-silver nanoparticles complexes loaded on nanostructured PBS polymer* (Poster), Paz Sevilla, Elisa Corda, Margarita Hernández, Michela Soccio, José V. García-Ramos, Concepción Domingo and Mari Cruz García-Gutierrez. (Together with Molecular Physics Dept.)
- *Detection of Pesticide Carbendazim by Surface-enhanced Raman Scattering (SERS) on Plasmonic Nanoparticles of Different Nature* (Poster), Leonardo Furini, Isabel López-Tocón, Juan Carlos Otero, Santiago Sánchez-Cortés, Carlos J.L. Constantino.

R3B Collaboration Meeting (*International non-UE congress*), Darmstadt (Germany), 16th-18th of June 2014.

- *Study of the unbound ^{13}Be in the S393 experiment* (Oral presentation), Guillermo Ribeiro.

VII Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (*National congress*), Pamplona, 22nd-25th of June 2014.

- *Cristalización de para-Hidrógeno: ¿una transición cuántica a temperatura finita?* (Oral presentation), Carlos Cabrillo, Félix Fernández-Alonso, Ricardo Fernández-Perea, Francisco J. Bermejo, Miguel A. González, Claudia Mondelli and Enmanuel Farhi.

16th European Conference on Composite Materials ICCM16 (*International UE congress*), Sevilla (Spain), 22nd-26th of June 2014.

- *Use of coal mining waste as pozzolanic material in new blended cement matrixes* (Poster), Raquel Vigil de la Villa, Rosario García, Mario Ramírez, Virginia Rubio, Moisés Frías, Olga Rodríguez, Eduardo Lahoz, Sagrario Martínez-Ramírez, Lucía Fernández-Carrasco and Íñigo Vegas.

TAS Collaboration Workshop: Status and Perspectives (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 26th-28th of June 2014.

- *TAS measurements along the rp-process path for accurate stellar weak-decay rates* (Oral presentation), Enrique Nácher.

XXIV Reunión Nacional de Espectroscopia- VIII Congreso Ibérico de Espectroscopía (*National congress*), Logroño, 9th-11th of July 2014.

- *Gaps induced by molecular linkage of plasmonic nanoparticles in colloidal suspensions for SERS enhanced pesticide sensing* (Oral presentation), Santiago Sánchez-Cortés, Jana Kubackova, D. Jancura and José V. García-Ramos.
- *Formation of ABTS radical cation in the presence of silver nanoparticles as revealed by surface-enhanced Raman scattering* (Poster), Adiane García-Leis, José V. García-Ramos, Zuzana Jurasekova, Gabriela Fabriciova, Marian Antalík, Daniel Jancura and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Experimental observation of Fano- and Lorentz-like line shapes in the optical extinction of plasmonic nanorods*, (Oral presentation), Fernando López-Tejiera, Niels Verellen, Ramón Paniagua-Domínguez, Dries Vercruysse, Denitza Denkova, Liesbet Lagae, Pol Van Dorpe, Víctor V. Moshchalkov and José A. Sánchez-Gil.
- *Optical spectroscopy of metal-semiconductor nanowires: Transparent nanocontacts*, (Poster), Diego R. Abujetas, Ramón Paniagua-Domínguez, Luis Froufe-Pérez, Juan J. Sáenz and José A. Sánchez-Gil.
- *Characterization of supramolecular complexes formed between non-steroidal anti-inflammatory drugs and cucurbit[n]urils in solution and adsorbed on silver nanoparticles*, (Poster), Paz Sevilla, Elisa Corda, Margarita Hernández, José V. García-Ramos and Concepción Domingo. (Together with Molecular Physics Dept.).
- *Time and space resolved optical emission diagnostics of laser induced breakdown muscle tissue samples* (Poster), J.J. Camacho, Luis Díaz, Sagrario Martínez-Ramírez, J.P. Cid, A. Marin-Roldan, S. Moncayo and J.O. Cáceres.
- *Structural modification of cultural heritage materials produced by CW CO₂ laser. Micro-Raman and Raman Imagen studies* (Poster), Sagrario Martínez-Ramírez, Luis Díaz, J.J. Camacho.
- *Raman, SERS and DFT analysis of mauve dye and its components* (Oral contribution), M.Vega Cañamares, and J.R. Lombardi.
- *Spectral characterization and temporal evolution of the induced plasma emission in the ablation of aluminium alloy* (Poster), V. Oliver, J.P. Cid, S. Lago, Luis Díaz, J.J. Camacho and J.M.L. Poyato.
- *Time characterization of the laser ablation plasma plume of CaO produced by a pulsed infrared TEA-CO₂ laser* (Poster), J.P. Cid, J.J. Camacho, Luis Díaz, V. Oliver and J.M.L. Poyato.
- *Time evolution of the infrared laser ablation plasma plume of SiO* (Poster), Luis Díaz, J. J. Camacho, J. P. Cid and J.M.L. Poyato.

5th EURISOL User Group Topical Meeting (*UE congress*), University of York (United Kingdom), 15th-17th of July 2014.

- *Detection of high-energy protons and gamma-rays using a novel LaBr₃(Ce)-LaCl₃(Ce) phoswich array* (Oral presentation), Enrique Nácher, Ángel Perea, Guillermo Ribeiro, José Sánchez del Río, Olof Tengblad, Mikael Mårtensson, Andreas M. Heinz and Thomas Nilsson.

Breakup reactions of exotic nuclei and related topics (*International non-UE congress*), Trento (Italy), 16th-18th of July 2014.

- *Reaction of the halo nucleus ¹¹Be on heavy targets at energies around the Coulomb barrier* (Oral presentation), Vicente Pesudo.

Nuclear Structure 2014 (NS2014) (*International non-UE congress*), Vancouver (Canada), 21st-25th of July 2014.

- *Nuclear Structure of light Halo Nuclei determined from Scattering on heavy targets at ISAC-II* (Oral presentation), Olof Tengblad, M^a José G. Borge, José Gómez-Camacho, Antonio Moro, Ismael Martel and Vicente Pesudo.

IEEE 57th International Midwest Symposium on Circuits and Systems (MWSCAS 2014) (*International non-UE congress*), Texas (EE.UU), 3rd-6th of August 2014.

- *Readout Electronic System for Particle Tracking in Secondary Electron Detectors* (Oral presentation), Alejandro Garzón-Camacho, Begoña Fernandez, M.A.G. Alvarez, Joaquín Ceballos and José M. de la Rosa.

SES 2014 – Surface Enhanced Spectroscopies (*International non-UE congress*), Chemnitz (Germany), 8th-10th of August 2014.

- *Highly efficient plasmonic nanoplatforms for sensitive surface-enhanced Raman detection of pollutants and peptides* (Oral presentation), Santiago Sánchez-Cortés, Adiane García-Leis, Jana Kubackova, Daniel Jancura, José V. García-Ramos, Mahmoud Ghomi, Belén Hernández.

ICORS 2014 - XXIV International Conference on Raman Spectroscopy (*International non-UE congress*), Jena (Germany), 10th-15th of August 2014.

- *Adsorption and SERS Investigation of Peptides and Proteins on Plasmonic Metal Nanoparticles* (Invited lecture), José V. García-Ramos, Alessandro Feis, Paz Sevilla, Belén Hernández, Mahmoud Ghomi and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Strategies to increase the SERS sensitivity in plasmonic platforms* (Invited lecture), Santiago Sánchez-Cortés, José V. García-Ramos, Daniel Jancura, Adianez García-Leis and Jana Kubackova.
- *Study of adsorption and detection of anthraquinone drug parietin on Ag nanoparticles by Raman scattering* (Poster), Gabriela Fabriciova, Eduardo López-Tobar, Mari Vega Cañamares, Santiago Sánchez-Cortés and Martin Backor.

32nd European Congress on Molecular Spectroscopy, Düsseldorf (Germany), from August 24 to August 29, 2014.

- *Synthesis, conformational and pharmacological study of esters derived from 3-methyl-3-azabicyclo[3.3.1]nonan-9 α (β)-ols* (Poster), I. Iriepa and J. Bellanato

Zakopane Conference on Nuclear Physics (*International non-UE congress*), Zakopane (Poland), 31st August-7th of September 2014.

- *Study of the unbound resonance ^{13}Be in a (p, 2p) reaction at GSI* (Oral presentation), Guillermo Ribeiro.

Euroschool on Exotic Beams (*International non-UE congress*), Padova (Italy), 7th-13th of September 2014.

<http://www.euroschoolonexoticbeams.be/site/pages/history>

- *Reaction of the halo nucleus ^{11}Be on heavy targets at energies around the Coulomb barrier* (Poster), Vicente Pesudo.
- *Novel experimental set-up for multiparticle decay experiments* (Poster), Irene Marroquín.

8th International Conference On Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS2014) (*International non-UE Congress*), Pekin (China), 8th-12th of September 2014.

- *Time resolved laser induced breakdown spectroscopy of swine muscle tissue samples* (Poster), Luis Díaz, J.J. Camacho, Sagrario Martínez-Ramírez and J.P. Cid, J.O. Caceres.

NUSTAR Week 2014 (*International UE congress*), Valencia (Spain), 22nd-26th of September 2014.

- *R3B in España* (Oral presentation), Olof Tengblad.

FAIRNESS 2014 (*International UE congress*), Vietri sul Mare (Italy), 22nd-27th of September 2014.

- *Study of the unbound ^{13}Be and the future of p2p reactions at FAIR* (Oral presentation), Guillermo Ribeiro and Olof Tengblad.

VI CPAN Days. Encuentros de Física Nuclear (*National congress*), Sevilla (Spain), 20th-22nd of October 2014.

- *Reacción del núcleo halo ^{11}Be contra blancos pesados a energías alrededor de la barrera coulombiana* (Oral presentation), Vicente Pesudo.
- *Estudio de núcleos no-ligados a energías relativistas para la colaboración R3B: ^{13}Be* (Oral presentation), Guillermo Ribeiro.

IV Congreso Latinoamericano De Archeometría (*International non-UE Congress*), Ciudad de México (México) 27th-31st of October 2014.

- *Caracterización de pigmentos en pintura mural romana como paso previo para la limpieza con láser* (Oral Presentation), P. C. Gutiérrez-Neira, J. Barrio Martín, I. Donate-Carretero, Sagrario Martínez-Ramírez, M. Cruz Medina-Sánchez and Ana Isabel Pardo Naranjo.

CBECiMat 2014 – Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciencia dos Materiais (*National Congress*), Cuiabá (Brasil), 9th-13th of November 2014.

- *Plasmonic Materials and Nanospectroscopy* (Plenary Lecture), Santiago Sánchez-Cortés.

Jornadas internacionales conmemorativas del 80 aniversario del IETCC (*International UE Congress*), Madrid (Spain), 12th-14th of November 2014.

- *Uso de residuos de la minería de carbón como adiciones activas al cemento* (Oral presentation), Moisés Frías, Olga Rodríguez, M.I. Sánchez De Rojas, Rosario García, Raquel Vigil, Íñigo Vegas, Eduardo Lahoz, Sagrario Martínez-Ramírez and Lucía Fernández-Carrasco.

XXIX Conference on Design of Circuits and Integrated circuits (DCIS 2014) (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 26th-28th of November 2014.

- *Spatial Detection System for Mini-Secondary Electrons Detectors* (Oral presentation), Alejandro Garzón-Camacho, Begoña Fernández, Marcos A. Álvarez, Joaquín Ceballos and José M. De La Rosa.

4th International Conference on Nanotek and Expo (International non-UE congress), San Francisco (USA), 1st-3rd of December 2014.

- *BIMENS-Bimetallic nanostars (Ag@Au) with high surface enhanced raman scattering (SERS) performance: Detection of β -Amyloid and its marker thioflavin T* (Invited lecture), José V. García-Ramos, Adianez García-Leis and Santiago Sánchez-Cortés.
- *Supramolecular complexation between drugs indomethacin, piroxicam and emodin and cucurbit[n]urils on solution and adsorbed on silver nanoparticles* (Poster), Paz Sevilla, Elisa Corda, Margarita Hernández, José V. García-Ramos and Concepción Domingo. (Together with Molecular Physics Dept.).
- *Plasmonic nanoparticles for surface-enhanced Raman pesticide sensing inside interparticle hot spots created by dithiols* (Poster), Santiago Sánchez-Cortés, Jana Kubackova, José Vicente García Ramos and Daniel Jancura.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

VI Jornadas Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (Nacional) Leioa (Spain), 22th of January 2014.

- *First detection of the ammonium ion in space supported by an improved determination of the 10-00 rotational frequency of NH_3D^+ from the ν_4 infrared band*. Maite Cueto, José Luis Doménech, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, José Cernicharo, B. Tercero, A. Fuente.

Faraday Discussion 168: Astrochemistry of Dust, Ice and Gas (International), Leiden, The Netherlands, 7th-9th of April 2014.

- *A study of aminoacid stability in samples of interstellar carbonaceous dust and ice analogues* (Oral presentation), Belén Maté, Víctor J. Herrero, Miguel Jiménez-Redondo, Isabel Tanarro, Yamilet Rodríguez-Lazcano, Óscar Gálvez and Rafael Escribano.

41st IOP Plasma Physics Conferences (International), London, U. K., 14th-17th of April 2014.

- *Diagnostics and modeling of cold plasmas with high hydrogen content; applications to molecular astrophysics* (Invited talk), Isabel Tanarro, Maite Cueto, Miguel Jiménez-Redondo, Víctor J. Herrero, José L. Doménech and José Cernicharo.
- *Neutral and ion kinetics in glow discharges of H_2/O_2 mixtures. Diagnostics and modelling* (Poster), Miguel Jiménez-Redondo, Esther Carrasco, Víctor J. Herrero and Isabel Tanarro.

The European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy (ECONOS). (International non-UE) Dole (France), May 11th-14th 2014.

- *Measurement of V-V vibrational relaxation rates in ortho-para collisions in N_2 at 77 K by double resonance stimulated Raman spectroscopy* (poster), Dionisio Bermejo and Raúl Z. Martínez.

The 22nd International Conference on Spectral Line Shapes. Tullahoma (USA), June 1st-6th 2014.

- *Measurement of V-V vibrational relaxation rates in ortho-para collisions in N_2 at 77 K by double resonance stimulated Raman spectroscopy* (poster), Dionisio Bermejo and Raúl Z. Martínez.

69th International Symposium on Molecular Spectroscopy (International), Champaign-Urbana, Illinois, USA, 16th-20th of June 2014.

- *Accurate laboratory measurements of vibration-rotation transitions of $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$* (Oral presentation), Maite Cueto, José Cernicharo, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro and José L. Doménech.

3PC Workshop: "Cold Plasmas and Astrochemistry: Gas and Dust" (International), Madrid, Spain, 7th-8th of July 2014.

- *Infrared spectroscopy of Molecular ion* (Invited talk), José L. Doménech.
- *Kinetics of neutrals and ions in cold molecular plasmas: gas and surface processes* (Invited talk), Isabel Tanarro, Miguel Jiménez-Redondo, Maite Cueto, José L. Doménech, Belén Maté and Víctor J. Herrero.

XXIV Reunión Nacional de Espectroscopia-VIII Congreso Ibérico de Espectroscopia (International), Logroño, 9th-11th of July 2014.

- *Bonding Properties in $\text{HNO}_3\cdot\text{HOCl}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$ Clusters* (Poster), Rafael Escribano, Pedro C. Gómez, F. Mine Balci and Nevin Uras-Aytemiz.

- *Stability of Glycine and Interstellar Carbonaceous Dust Analogs under UV Irradiation and Electron Bombardment* (poster), Belén Maté, Isabel Tanarro, Miguel A. Moreno, Miguel Jiménez-Redondo, Víctor J. Herrero, Vicente Timón and Rafael Escribano
- *Infrared activation of the breathing mode of methane* (Poster), Miguel A. Moreno, Rafael Escribano, Óscar Gálvez, Víctor J. Herrero, Belén Maté and Vicente Timón.

XXII Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (XXII ESCAMPIG) (International), Greifswald (Germany), 15th-19th of July 2014.

- *High resolution infrared absorption spectroscopy of ions of astrophysical interest: $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$* . (Poster), Maite Cueto, José L. Doménech, Víctor J. Herrero, José Cernicharo and Isabel Tanarro.
- *Neutral and ion kinetics in glow discharges of H₂ / O₂ mixtures. Diagnostics and modelling* (Poster), Miguel Jiménez-Redondo, Esther Carrasco, Víctor J. Herrero and Isabel Tanarro.

20th European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2014) (European Union), Gotheborg (Sweden), 24th-29th August 2014.

- *Vibrational spectroscopy and kinetics of the astronomically relevant ArH⁺ ion in Ar/H₂ cold plasmas* (Oral presentation), Maite Cueto, Miguel Jiménez-Redondo, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro, José L. Doménech, M. J. Barlow, B. M. Swinyard and José Cernicharo.
- *Low-temperature Inelastic Collisions of Water with Helium. Theory versus Experiment* (Poster), Guzmán Tejada, E. Carmona-Novillo, E. Moreno, M. I. Hernández, José M. Fernández and Salvador Montero.
- *Dynamics of the Asymmetric D+MuH reaction* (poster) F. J. Aoiz, J. Aldegunde, Víctor J. Herrero and V. Sáez Rábanos

23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (BOLOGNA2014) (International non-EU), Bologna (Italy), 2nd-6th September 2014.

- *Measurement of V-V vibrational relaxation rates in ortho-para collisions in N₂ by double resonance stimulated Raman spectroscopy* (poster), Dionisio Bermejo and Raúl Z. Martínez.
- *Inelastic Collisions in O₂+He Supersonic Jets by High-Resolution Raman Spectroscopy* (Oral contribution), F. Gámez, E. Moreno, Guzmán Tejada, M. Bartolomei, M. I. Hernández, J. Campos-Martínez, José M. Fernández and Salvador Montero.
- *New accurate measurement of $^{36}\text{ArH}^+$ and $^{38}\text{ArH}^+$ ro-vibrational transitions by high resolution IR absorption spectroscopy and ion kinetics in Ar/H₂ cold plasmas* (Poster), Maite Cueto, Miguel Jiménez-Redondo, José Cernicharo, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro and José L. Doménech.

Helium-mediated Synthesis, Soft-Landing, and Spectroscopy of Metal Nanoparticles on Surfaces (HeSSSMe) (International), Madrid (Spain) 10th-11th of October 2014.

- *Organizing Committee:* Maria Pilar de Lara Castells, José M. Fernández, Martí Pí, and Alexander O. Mitrushchenko

Workshop on Interstellar Matter 2014 (International), Sapporo (Japan) 16th-18th of October 2014.

- *Infrared activation of the breathing mode of methane* (Poster), Rafael Escribano, Óscar Gálvez, Víctor J. Herrero, Belén Maté, Vicente Timón and Miguel A. Moreno.
- *Stability of Glycine and Interstellar Carbonaceous Dust Analogs under UV Irradiation and Electron Bombardment* (Poster), Belén Maté, Isabel Tanarro, Miguel A. Moreno, Miguel Jiménez-Redondo, Víctor J. Herrero, Vicente Timón and Rafael Escribano.

8th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects (PHOTODYNAMICS), (International non-EU), Oaxaca (Mexico), 26th-31st October 2014.

- *Inelastic Collisions of H₂O and O₂ Molecules at Low Temperature by Raman Spectroscopy* (Invited talk), José M. Fernández, Guzmán Tejada, E. Moreno, F. Gámez, E. Carmona-Novillo, M. I. Hernández and Salvador Montero.
- *Collisions of Water with Helium: Calculations versus Experiment* (Invited talk), M. I. Hernández, E. Carmona-Novillo, M. Bartolomei, J. Campos-Martínez, Guzmán Tejada, E. Moreno, José M. Fernández and Salvador Montero.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

58th Annual Meeting of the Biophysical-Society (International non-UE congress), San Francisco, CA. (USA), 15th-19th of February 2014.

- *Protein-Protein and Protein-Membrane Interactions Regarding the Erbb2/Trastuzumab-Fab Complexes. A Coarse-Grained Molecular Dynamics Description* (Poster), J. Felipe Franco-González, Víctor Cruz, Javier Ramos and Javier Martínez-Salazar.

March Meeting 2014 of the American Chemical Society (*International non-UE congress*), Denver, Colorado. (USA), 2nd-8th of March 2014.

- *Chain configurations, glass transition and polymer dynamics in polymer nanoparticles under 3D confinement* (Oral), Aurora Nogales, Daniel E. Martínez-Tong, Michaela Soccio, Alejandro Sanz and Tiberio A. Ezquerro.

11th Annual International Workshop on Nanomechanical Sensing, (*UE congress*) Madrid, (Spain), 30th April - 2nd of May 2014.

- *Thermomechanical response of a semicrystalline polymer in the vicinity of the melting by using cantilever technology*. (Oral), Giovanni Luongo, Michela Soccio, Daniel R. Rueda, Mari Cruz García-Gutiérrez, C. Esteves, O. Ahumada and Tiberio A. Ezquerro

NANOSTRUC 2014, 2nd International Conference on Structural Nano Composites (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 20th-21th of May 2014.

- *Broadband Dielectric Spectroscopy of Nanocomposites Based on PVDF and Expanded Graphite* (Póster), Amelia Linares, José C. Canalda, Alejandro Sanz, Anna Szymczyk, Z. Roslaniec and Tiberio A. Ezquerro.

E-MRS 2014 Spring Meeting, (*UE congress*) Lille (France) 27th - 29th of May 2014.

- *Online monitoring of laser induced periodic surface structures formation on polymer films by grazing incidence small angle x-ray scattering*. (Poster), Esther Rebollar, Ignacio Martín-Fabiani, Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Mari Cruz García-Gutiérrez, Daniel R. Rueda, Giuseppe Portale, Tiberio A. Ezquerro and Marta Castillejo.

ICOE2014, The 10th International Conference on Organic Electronics (*UE congress*), Módena, (Italy), 11th-13th of June 2014.

- *Nanoscale structure-property relationships in all-polymer heterojunctions*. (Oral), Mari Cruz García-Gutiérrez, Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Michaela Soccio, Daniel E. Martínez-Tong, Tiberio A. Ezquerro and Benjamin Watts.

33rd Workshop & Symposium "Osteozyt und Osteonekrose" (*UE congress*), Halle (Germany), 13th-15th of June 2014.

- (Participation), Francisco J. Baltá Calleja.

Internationale wissenschaftliche Tagung Polymerwerkstoffe Polymertec¹⁴ (*UE congress*), Merseburg (Germany), 25th-27th of June 2014.

- *Nano and micromechanics of polymers and nanocomposites relating to nanostructure* (Invited talk), Francisco J. Baltá Calleja.

4th International Colloids Conference, (*UE congress*) Madrid (Spain) 15th-18th of June 2014.

- *Fluorescence characterization of drugs carriers systems formed by drug-silver nanoparticles complexes loaded on nanostructured PBS polymer*. (Poster), Paz Sevilla, Elisa Corda, Margarita Hernández, Michela Soccio, José V. García-Ramos, Concepción Domingo and Mari Cruz García-Gutiérrez.

VII Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas. (*National congress*), Pamplona, (Spain), 22nd-25th of June 2014.

- *Structural Information from Biological Systems by small angle scattering*. (Invited talk), Aurora Nogales.

Macro 2014: IUPAC Polymer Division (*International non-UE congress*), Chiang Mai (Tailandia), 6th-11th July 2014.

- *Depth-sensing indentation in inorganic fullerene-like reinforced thermoplastic matrices* (Oral), Araceli Flores, M. Naffakh, Ana M. Díez-Pascual, Fernando Ania and Marian A. Gómez-Fatou.
- *Local Surface Mechanical Properties of SWCNT-based Hierarchical Composites* (Oral), Fernando Ania, Araceli Flores, M. Ana M. Díez-Pascual and Marian A. Gómez-Fatou.

XXIV Reunión Nacional de Espectroscopia-VIII Congreso Ibérico de Espectroscopia (*National congress*), Logroño (Spain), 8th-11th of July 2014.

- *Diameter selection of carbon nanotubes in arrays of polymer/SWCNT nanowires by template wetting* (Oral), Mari Cruz García-Gutiérrez and Concepción Domingo.

XIII Reunión del Grupo Especializado de Polímeros (GEP 2014) (*National congress*), Gerona (España), 7th-10th September 2014.

- *Thermal and mechanical properties of recycled poly(lactic acid)* (Poster), C. Fonseca, Beatriz García, Leticia Martín, A. Ochoa, Araceli Flores and Fernando Ania.

Modeling of Biomolecular Systems Interactions, Dynamics, and Allostery: Bridging Experiments and Computations (*International non-UE congress*), Istanbul (Turkey) 10th-14th of September 2014.

- *The Maturation Process of HPV16 Virus Like Particles as Revealed by Light Scattering, Z-Potential and Transmission Electron Microscopy* (Poster), Juan Francisco Vega, E. Vicente-Alique, Rafael Núñez-Ramírez, Y. Wang and Javier Martínez-Salazar.
- *Study of the Interaction of the Extracellular Domain in the ErbB2-ErbB2 homodimer and ErbB2-Trastuzumab by Hydrodynamic Properties and Computational Models* (Poster), Javier Ramos, Juan Francisco Vega, Víctor L. Cruz, P. Hu, J. Cortés and Javier Martínez-Salazar.

8th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its applications (*International congress*), Wista (Poland), 14th-19th of September 2014.

- *Crystallization of aromatic polyesters by monitoring the dielectric B-relaxation: a quasi real time full dielectric method* (Oral), Michaela Soccio, N. Lotti, A. Munari, Aurora Nogales and Tiberio A. Ezquerra.
- *Nanostructured Ferroelectric Polymers. Impliations on ferroelectricity and relaxation* (Oral), Daniel E. Martínez-Tong, Michaela Soccio, Mari Cruz García-Gutiérrez, Daniel Rueda, Alejandro Sanz, Aurora Nogales and Tiberio A. Ezquerra.
- *Analysis of the conductivity of conjugated polymer/furellene based blends by dielectric spectroscopy* (Poster), Jin Cui, Daniel E Martínez-Tong, Alejandro Sanz, Tiberio Ezquerra and A. Nogales.
- *Broadband Dielectric Relaxation of P(VDF-TrFE) Ferroelectric Nanoparticles* (Poster), Daniel E. Martínez-Tong, Michaela Soccio, Alejandro Sanz, Aurora Nogales and Tiberio A. Ezquerra.

XIV Congreso Nacional de Propiedades Mecánicas de Sólidos, PMS 2014 (*National congress*), Linares, 17th-19th September 2014.

- *Nanoindentation in polymer-based nanocomposites*, (Oral), Araceli Flores.

Jornadas de microscopía AFM, Estado del arte, soluciones y sesiones prácticas de manejo del microscopio MultiMode 8 de Bruker (*National congress*), Madrid (Spain) 23rd-24th of September 2014.

- Organizing Committee: Mari Cruz García-Gutiérrez, Aurora Nogales, Esther Rebollar, Tiberio A. Ezquerra, J. Beaumale, P. Prado.

6th International Conference on Polymer Behaviour (ICPB6) (*International non-UE*), University of Vienna, Austria, 22nd-26th September 2014.

- *Nanoindentation in polymers* (Invited talk), Araceli Flores.

SAXS Workshop at ALBA Synchrotron (*National congress*), Barcelona (Spain) 1st of October 2014.

- *X-ray Scattering in polymer science: From heterogeneous systems to nanostructures*. (Plenary Lecture), Mari Cruz García-Gutiérrez.

Meeting on Opportunities for collaboration to the construction of LoKI — a broad-band SANS instrument at the ESS (*National congress*), Bilbao, (Spain) 13th of October 2014.

- *SANS studies in macromolecular materials* (Invited talk) Aurora Nogales.

Seminario de Aplicaciones Avanzadas de la Microfluorescencia y Difracción de Rayos X (*National congress*), Madrid (Spain) 14th of October 2014.

- *Dispersión de rayos X a ángulos bajos (SAXS) para la caracterización de la nanoestructura en materiales jerarquizados*. (Invited talk) Aurora Nogales.

Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales (*International non-UE congress*), Santa Fe (Argentina), 21st-24th Octubre 2014.

- *Nanolitografía con materiales poliméricos: de la fabricación a las aplicaciones* (Plenary Lecture), Tiberio A. Ezquerra.

6th Spanish Workshop in Nanolithography (*National congress*), Zaragoza (Spain), 28th-30th of October 2014.

- *Gold/Polymer nanogratings fabricat ed by Nanoimprint Lithography for application as Surface Enhanced Raman Scattering sensors* (Oral), Tiberio Ezquerra, Michaela Soccio, Margarita Hernández, Mari Cruz García-Gutiérrez, Concepción Domingo, N. Alayo, Frances Pérez-Murano, Esther Rebollar, M. Sanz and Marta Castillejo.

- *Nanostructuring Thin Polymer Films with 2 and 3 -Beam Single Pulse Laser Interference Lithography* (Póster), Ignacio Martín-Fabiani, Stephen Riedel, Daniel R. Rueda, Jan Siegel, Johannes Boneberg, Tiberio A. Ezquerro and Aurora Nogales Ruiz.
- *Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Semiconducting Polymers: Poly(3-hexylthiophene)*. (Póster), Álvaro Rodríguez-Rodríguez, Michaela Soccio, Tiberio A. Ezquerro, Esther Rebollar, Marta Castillejo, Mari Cruz García-Gutiérrez.

4.2 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Prof. N. Sandulescu**, National Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucharest, Romania, 1st-19th of January 2014.
- ❖ **Prof. Y. Fujita**, Department of Physics, Osaka University, Osaka, Japan, 3rd-5th of February 2014.
- ❖ **Prof. M. Hochlaf**, University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 16th-18th of February 2014.
- ❖ **Prof. Jorge Hirsch**, Universidad Nacional Autónoma de México. 3rd-7th of March 2014.
- ❖ **Prof. Gerardo Ortiz**, Indiana University. USA. 13th-17th of March 2014.
- ❖ **Dr. Ruben Fossion**, Universidad Nacional Autónoma de México, México DF, México, 17th-21st of March 2014.
- ❖ **Dr. Javier Olmedo Nieto**, Universidad de La República, Montevideo, Uruguay, 3rd-22nd of April 2014.
- ❖ **Dra. Mercedes Martín Benito**, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands, 6th-11th of April 2014.
- ❖ **Prof. Stuart Pittel**, University of Delaware, USA, 21st-30th of April 2014.
- ❖ **Prof. José María Martín Senovilla**, Universidad del País Vasco, Bilbao, 19th-20th of May 2014.
- ❖ **Dr. Ryotaro Kase**, Tokyo University of Science, Japan, 18th-25th of July 2014.
- ❖ **Prof. Shinji Tsujikawa**, Tokyo University of Science, Japan, 31st of August - 20th of September 2014.
- ❖ **Prof. Almas Sadreev**, Kirensky Institute of Physics, Russia, 1st of September 2014.
- ❖ **Dr. Sachiko Kuroyanagi**, Tokyo University of Science, Japan, 12th-27th of September 2014.
- ❖ **Prof. Yang Zhao**, Nanyang Technological University, Singapore, 26th of September 2014.
- ❖ **Prof. Anton Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 3rd-12th of November 2014.
- ❖ **Dr. Mitko Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 3rd-12th of November 2014.
- ❖ **Prof. Shinji Tsujikawa**, Tokyo University of Science, Japan, 22nd of November-1st of December 2014.
- ❖ **Dr. Carlos Barceló Serón**, Instituto de Astrofísica de Andalucía, Granada, 1st-3rd of December 2014.
- ❖ **Dr. Antonio García-García**, Cambridge University, UK. 15th-19th of December 2014.

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

- ❖ **Dña. Chiara Deriu**, Master student, University of Bologna, Ravenna, Italy, 1st of January-28th of February.
- ❖ **Jana Kubackova**, Ph. D. student, "P. J. Safarik of Kosice" University, Slovak Republic, 1st of January- 31st March, 1st of September – 28th of October 2014.
- ❖ **Dr. Rogelio Rodríguez Oliveros**, Humboldt University, Berlin, Germany, 1st-16th of March 2014.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Associated Professor, "P. J. Safarik of Kosice" University, Slovak Republic, 18th of March-17th of April, 16th-27th of October 2014.
- ❖ **Dr. K. Hara** Associated Professor, Hokkaido University, Japan, 21st -23rd of March 2014.
- ❖ **Martin Šorm**, University of West Bohemia, Czech Republic, 17th of March – 17th of April 2014.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Associated Professor, "Paris XIII" University, Paris, France, 2nd-9th of May, 27th of October- 25th of November 2014.
- ❖ **Dr. Gabriela Fabriciova**, Assistant Professor, "P. J. Safarik of Kosice" University, Slovak Republic, 16th - 23rd of May, 1st of October-3rd of November 2014.
- ❖ **Dr. Vincenzo Giannini**, Imperial College, London, UK, 27th of May-14th of June 2014.
- ❖ **Dña. Valeria Buccilli**, Master student, Universidad Autónoma de Madrid, Spain. 1st - 30th of June 2014.
- ❖ **Dña. Irene Bonacini**, Ph.D. student, University of Bologna, Ravenna, Italy, 5th of June-5th of September.
- ❖ **D. Nial Prendiville**, Master student, Universidad Autónoma de Madrid, Spain, 5th of June - 30th of September.
- ❖ **D. Leonardo Furini**, Ph.D. student, "Estatal Paulista" University, Presidente Prudente, Brazil, 15th -30th of June 2014.

- ❖ **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 1st of September -28th of November 2014.
- ❖ **Dña. Francesca Gallazzi**, Master student, University of Bologna, Ravenna, Italy, since 1st of September.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 19th -27th of October 2014.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, Full Professor, “Paris XIII” University, Paris, France, 27th of October- 25th of November 2014.
- ❖ **Dña. Laura Blanco Zubiaguirre**, Ph.D. student, Universidad del País Vasco, Bilbao, Spain, 3rd of November-21st of December of 2014.
- ❖ **Prof. Jaime Gómez Rivas**, FOM-Institute AMOLF, Philips Research Labs, Eindhoven, The Netherlands, 24th-27th of November 2014.
- ❖ **Prof. Eugenio R. Méndez**, CICESE, Ensenada, Mexico, 13th-17th of December 2014.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Dr. Matthias Kühnel**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 9th-15 th of June 2014.
- ❖ **Ms. Claudia Goy**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 5th of June- 5th of July 2014.

4.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Uriel Piedra**, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Méjico, 15th May – 15th August 2014.

4.3 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Dr. Iñaki Garay Elizondo.

Universidade Federal do Pará, Belém, Brazil.

Semiclassical Limit of Loop Quantum Gravity: From Graphs to Manifolds.

23rd January 2014.

Prof. Jean-Pierre Luminet.

Centre National de la Recherche Scientifique, Observatoire de Paris, France.

The Shape of Space, from Black Holes to the Universe.

28th January 2014.

Dr. Javier Olmedo Nieto.

Instituto de Física, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

Loop Quantization of Spherically Symmetric Vacuum Spacetimes.

30th January 2014.

Prof. Alejandro Pérez.

Centre de Physique Théorique, Centre National de la Recherche Scientifique, Marseille, France.

Statistical and Entanglement Entropy for Black Holes in Quantum Geometry.

25th June 2014.

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

Dr. Carlos Barceló Serón.

Instituto de Astrofísica de Andalucía, IAA-CSIC, Granada.

Emergent Electromagnetism: Some Training towards a Theory of Emergent Gravity.

11th March 2014.

Dr. Prado Martín-Moruno.

Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal.
Cosmological Solutions in Bigravity.
 25th March 2014 .

Dr. Álvaro de la Cruz Dombriz.

Universidad Complutense de Madrid.
Averaging and Modified Gravity Theories: An Overview of Tools Able to Explain the Cosmological Late-Time Acceleration.
 1st April 2014.

Dr. Gianluca Calcagni.

Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid.
Cosmología y Gravedad Cuántica.
 6th May 2014.

Prof. José M. M. Senovilla.

Universidad del País Vasco, Bilbao.
Junction Conditions in Gravity Theories.
 20th May 2014.

Dr. Gil Jannes.

Universidad Carlos III de Madrid.
The Cosmological Constant Problem: A Lesson from Helium-3.
 3rd June 2014.

Dr. Vinicius Busti.

Astrophysics, Cosmology and Gravity Center, University of Cape Town, South Africa.
Supernovae as Probes of Cosmic Parameters: Estimating the Bias from Under-Dense Lines of Sight.
 10th June 2014.

Dr. Franco D. Albareti.

Instituto de Física Teórica, Madrid.
Vacuum Energy (Again), but Now It Seems Dark Matter.
 19th November 2014.

Dr. Markus Müller.

Universidad Complutense de Madrid.
Topological Quantum Computation - From Concepts To Experiment.
 10th December 2014.

International Loop Quantum Gravity Seminar---Phone seminar, joint with 20 international institutions.**Dr. Pietro Donà.**

International School for Advanced Studies, Trieste, Italy.
Matter Matters in Asymptotically Safe Quantum Gravity.
 21st January 2014.

Prof. Bianca Dittrich.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.
A New Vacuum for Loop Quantum Gravity.
 4th February 2014.

Drs. Marc Geiller and Simone Speziale.

PennState University, State College, PA, USA, and Centre de Physique Théorique de Marseille, Marseille, France.
Discussion on Simplicity Constraints in Spin Foam Models.
 4th March 2014.

Dr. Sebastian Steinhaus.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.
Quantum Group Spin Nets: Refinement Limit and Relation to Spin Foams.
 18th February 2014.

Dr. Max Dohse.

Universidad Nacional Autónoma de México, Morelia, Mexico.
S-Matrices for General Boundary QFT on Anti de Sitter Spacetime.
 18th March 2014.

Prof. Laurent Freidel.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.
Continuum Limit and Renormalization.
 1st April 2014.

Dr. Antonia Zipfel.

Warsaw University, Poland.
Linking Canonical and Covariant LQG.
 15th April 2014.

Drs. Ivan Agullo, Aurélien Barrau and Guillermo A. Mena Marugán.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA; Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie, Grenoble, France, and Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC, Madrid, Spain.
LQC and the Very Early Universe.
 29th April 2014.

Prof. Jorge Pullin.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.
Hawking Radiation in LQG.
 13rd May 2014.

Dr. Javier Olmedo Nieto.

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.
Casimir Effect on a Quantum Geometry.
 2nd September 2014.

Dr. Brajesh Gupt.

Penn State University, State College, USA.
Phenomenological Consequences of Quantum Geometries in LQC.
 30th September 2014.

Prof. Carlo Rovelli.

Centre de Physique Théorique, Centre National de la Recherche Scientifique, Marseille, France.
White Holes.
 14th October 2014.

Prof. Jerzy Lewandowski.

Warsaw University, Poland.
New Applications for LQG.
 28th October 2014.

Dr. Philipp Hoehn.

Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.
Lorentz Transformations from Abstract Quantum Theory: A Thought Experiment.
 11th November 2014.

Drs. Hal Haggard and Aldo Riello.

Bard College, New York, USA and Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada.
 $SL(2, \mathbb{C})$ Chern-Simons Theory and Spinfoam Gravity with a Cosmological Constant.
 25th November 2014.

Dr. Maximilian Hanusch.

University of Paderborn, Germany.
Invariance of Connections and Measures in Loop Quantum Cosmology.
 9th December 2014.

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

Dr. Vincenzo Giannini.

Imperial College, London (UK).

Advances in Theory of Plasmonics: Boosting Light-Matter Interaction.

28th May 2014.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dr. Jean-Baptiste Bossa.

Leiden Observatory (Holland).

Porosity measurements of interstellar ice mixtures.

13th February 2014.

Dr. Josep M. Trigo.

Instituto de Ciencias del Espacio CSIC (Barcelona)

Estudiando NEOs, asteroides, cometas y sus fragmentos en el Instituto de Ciencias del Espacio: repositorio de meteoritos antárticos de NASA

4th March 2014.

Dr. Ana María Fernández Díaz.

Instituto de Medio Ambiente CIEMAT (Madrid)

Desarrollos experimentales y numéricos: estudio de arcillas como barreras confinantes

18th March 2014

Dr. Carles Corbella.

Ruhr-University Bochum (Germany).

Interacciones plasma-superficie caracterizadas mediante experimentos con haces de partículas.

17th June 2014

4.3.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Dra. Ana María Díez Pascual

Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), Madrid (Spain).

Desarrollo de nanocompuestos poliméricos basados en poli(éter-éter-cetona) y nanotubos de carbono.

23rd April 2014.

Dr. Mikhail Zolotukhin

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México (Méjico).

Linear, Ultra High Molecular Weight aromatic polymers - At last!

3rd November 2014.

Prof. Alejandro Müller

IKERBASQUE, Institute for Polymer Materials and Polymer Science and Technology Department, Faculty of Chemistry, University of the Basque Country, Donostia-San Sebastián (Spain).

The influence of chain topology on the nucleation and crystallization kinetics of cyclic versus linear poly(ϵ -caprolactone)s and their nanocomposites with carbon nanotubes. 7th November 2014.

4.4 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS

(De una semana o más / Longer than a week)

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

Jorge Dukelsky Bercovich.

- Indiana University, USA, 9th-14th of May 2014.

- Rice University, Houston, USA, 14th-21st of May 2014.
- Charles University, Prague, Czech Republic, 3rd-8th of November 2014.
- University of Stuttgart, Germany, 19th-21st of November 2014.

Eduardo Garrido Bellido.

- Institute of Physics and Astronomy, Aarhus University, Denmark, 31st of March – 4th of April 2014.
- Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Pisa, Italy, 24th-28th of November 2014.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Universidad Andrés Bello, Santiago de Chile, Chile, 4th-12th of September 2014.
- Tokyo University of Science, Japan, 3rd-16th of November 2014.

María Luisa Senent Díez.

- Universidad Mohammed V, Rabat Morocco, 9th-16th of June 2014.
- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 6th-10th of October 2014.
- Universidad Túnez El Manar, 15th-19th of October 2013
- University Paris-Est, Marne la Vallée, France, 23rd of October 2014 – 5th of November 2014

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Nanyang Technological University, Singapore, 13th-24th of November 2014.

Óscar Moreno Díaz

- Center for Theoretical Physics and Laboratory for Nuclear Science, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (Massachusetts), USA, January–December 2014.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- Paris XIII University, Paris, France, 12th-17th of May, 29th-31st of October 2014.
- P. J. Safarik of Kosice University, Slovak Republic, 25th of May- 2nd of June, 23th of July-28th of August 2014.
- Paulista State University (UNESP), Presidente Prudente, Brazil, 1st-9th November 2014.
- Sao Paulo University, Sao Paulo, Brazil, 14-23th November 2014.

Olof Tengblad.

- IGISOL, University of Jyväskylä, Finland, 23 -30th of June 2014.
- TRIUMF, Vancouver, Canada, 22nd of June- 2nd of July 2014.
- CERN, Geneva, Switzerland, August-September 2014.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 2-10th/10 -19th of October 2014.

Carlos Cabrillo.

- Institute Lau Langevin, Grenoble, France, 9th-19th of December 2014.

Andrea Jungclaus.

- RIKEN, Tokyo, Japan, April 2014.

José A. Sánchez Gil.

- Institut für Physik, “Humboldt University”, Berlin, Germany, 17th-21th of September 2014.
- ICD-LNIO, “Technologie de Troyes” University, France, 7th-12th of December 2014.

Alejandro Garzón Camacho.

- CERN, Geneva, Switzerland, 6th-12th of October 2014.

Vicente Pesudo Fortes.

- TRIUMF, Vancouver, Canada, 2nd-12th of August 2014.

Jan Taprogge.

- RIKEN, Tokyo, Japan, 18th of February - 5th of March 2014.

Andrés Illana Sison.

- IGISOL-University of Jyväskylä, Finland, 28th of May - 13th of June 2014.

Irene Marroquín Alonso.

- IGISOL, University of Jyväskylä, 28th of May - 18th of June 2014.
- ISOLDE, Geneva, Switzerland, 2nd of October - 20th of October 2014
- ISOLDE, Geneva, Switzerland, 12th of November - 19th of November 2014.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 21st-29th of April 2014.
- GSI, Darmstadt, Germany, 1st-10th of October 2014.

Enrique Nácher González.

- JYFL, Jyväskylä, Finland, 14th-21st of February 2014.
- RIKEN-NISHINA, Tokyo, Japan, 2nd-10th of April 2014.
- GSI, Darmstadt, Germany, 27th of September - 3rd of October 2014.
- ISOLDE, Geneva, Switzerland, 13th - 23rd of October 2014.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Miguel Jiménez Redondo.**

- GREMI, Unité de Recherche Associée au CNRS-Université d'Orléans, Orleans, France, 1st of October-22nd of December 2014.

José Luis Doménech Martínez.

- Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA), Paris-Créteil, France, 8th-14th of December 2014.

José M^a Fernández Sánchez.

- Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA), Paris-Créteil, France, 8th-14th of December 2014.

Vicente Timón Salinero.

- Universidad Mohammed V, Rabat Morocco, 9th-16th of June 2014.

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

- Swiss Light Source at PSI, Villigen, Switzerland, 31st of August - 6th of September 2014.

Ignacio Martín-Fabiani

- University of Surrey, Guildford, U.K, 29th of March - 1st of August 2014.

CAPÍTULO 5

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

CHAPTER 5

***TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES***

5.1 DOCENCIA / TEACHING

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

Pedro Sarriguren Suquibide.

- Estructura Nuclear – Máster Interuniversitario en Física Nuclear. (Master) – (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid.
24th-28th February 2014 – 12 horas.
- Estructura Nuclear – Máster Interuniversitario en Física Nuclear. (Master) – (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid.
15th-19th December 2014 – 12 horas.

Guillermo A. Mena Marugán.

- Prácticas Externas – Grado en Física – Grade – National Official – Universidad Complutense de Madrid
1st February - 6th of June 2014 – 150 hours.

Carlos Esebbag Benchimol.

- Cálculo II. Grado en Ingeniería. Universidad de Alcalá.
22nd January – 9th May 2013 – 176 hours.
- Matemáticas. Grado de Químicas. Universidad de Alcalá.
9th September 2013 – 20th December 2014 – 105 hours.

Luis J. Garay Elizondo.

- Relatividad General – Máster en Física Teórica – National Official -- Universidad Complutense de Madrid
1st October 2014 – 1st February 2015 – 45 hours.
- Complementos de Geometría y Teoría de Grupos en Física – Máster en Física Teórica, – National Official - Universidad Complutense de Madrid
15th February 2014 – 1st June 2014 – 23 hours.
- Electrodinámica Clásica – Grado en Física – National Official – Universidad Complutense de Madrid
1st October 2014 – 22 hours.

Óscar Moreno Díaz.

- Energía Nuclear – Máster en Energía - National Official --Universidad Complutense de Madrid
January 2014 – 10 horas.
- Física Nuclear - Licenciatura en Física y Máster en Física Fundamental - National Official --Universidad Complutense de Madrid.
January 2014 – 10 horas.

Elvira Moya Valgañón.

- Energía Nuclear – Máster en Energía - National Official -Universidad Complutense de Madrid
January 2014 – 107 hours.
- Estructura Nuclear - Master Interuniversitario en Física Nuclear - National Official --Universidad Complutense de Madrid
December 2014 – 75 hours
- Física Nuclear y de Partículas - Licenciatura en Física – National Official UCM
October 2014 – 14 hours

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

Sagrario Martínez Ramírez.

- Prácticas Externas Extracurriculares– CC. Químicas – Degree – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
21 April - 500 hours.

Santiago Sánchez Cortés.

- Espectroscopia Óptica e Nanopartículas: Correlação, Fundamentos e Aplicações--Ciencia e Tecnologia de

Materiais-- PhD. Âmbito Internacional--UNESP-Universidade Estadual Paulista, Presidente Prudente (Brazil).
3rd November—10 hours.

Olof Tengblad.

- Laboratory Project: Experimental Techniques in plasmas, nuclear fusión and materials – Master in Plasma Physics and Nuclear Fusion – Âmbito internacional – Interuniversitario, coordinado por la Universidad Carlos III.
- **20th March—60 hours.**

José Antonio Sánchez Gil.

- Materiales Avanzados - Master – Âmbito Nacional – Trabajo fin de máster - Universidad Autónoma de Madrid—**February-June 2014.**

José Sanchez del Río.

- Laboratory Project: Experimental Techniques in Nuclear Physics – Master in Plasma Physics and Nuclear Fusion – Âmbito Internacional – Interuniversitario, coordinado por la Universidad Carlos III
- 28th March—10 hours .**

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- Física Nuclear Experimental--Master Erasmus Mundus in Plasma Physics and Nuclear Fusion – Âmbito Internacional – Interuniversitario, coordinado por la Universidad Carlos III –
- 28th Marzo--10 hours.**

Andrés Illana Sison.

- Laboratory Project: Experimental Techniques in Nuclear Physics – Master in Plasma Physics and Nuclear Fusion – Âmbito Internacional – Interuniversitario, coordinado por la Universidad Carlos III –
- 20th March--9 hours.**

Enrique Nácher González.

- Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials --European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics--Âmbito Internacional--Interuniversitario, coordinado por la Universidad Carlos III-
- 3rd February-2nd March--10 hours.**
- Curso de Instrumentación Nuclear--dentro de la asignatura “Física Nuclear Experimental”--Master Interuniversitario en Física Nuclear--Âmbito Internacional--Coordinado por la Universidad de Sevilla
- 16th-20th December 2013--2 hours.**

Mª Paz Sevilla Sierra.

- Física Aplicada a Farmacia – Grado de Farmacia - National Official – Universidad Complutense de Madrid.
- 11th October- 10 hours**
- Fisicoquímica Farmacéutica - Grado de Farmacia - National Official – Universidad Complutense de Madrid.
- 15th August- 210 hours
- Resonancia Magnética Nuclear, Ultrasonidos e Imagen Molecular – Máster Universitario en Física Biomédica – National Official – Universidad Complutense de Madrid.
- 26th May – 6 hours.**

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Carmen Arribas Arribas.

- Ciencia de los Materiales – Grado en Ingeniería Aeroespacial – National Official – Universidad Politécnica de Madrid
- 3rd septiembre 2014 – 40 hours.**
- Química – Grado en Ingeniería Aeroespacial - National Official – Universidad Politécnica de Madrid
- 3rd september 2014 – 150 hours.**
- Constituents Materials and Characterization (Módulo 1) – Master in Composite Materials – National Official – Escuela Técnica Superior de Ingenieros Aeronáuticos. UPM
- 1st octubre 2014 – 8 hours.**

Francisco Javier Ramos Díaz.

- Tutorías de prácticas. Introducción a la Investigación (JEA Intro 2014). *Cellular automaton model for Chagas Disease*
1st October 2014 – 300 hours.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Experimentos, teorías y simulación por ordenador aplicados a la reología de poliolefinas - Máster - National Oficial - Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas, ICTP/CSIC
28th February 2014 - 2 hours.

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

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

Jorge Dukelsky Bercovich

- *Integrable Richardson-Gaudin models in mesoscopic physics*. University of Stuttgart. Germany, 21st of November 2014.

José González Carmona

- *Many-body effects in 2D and 3D Dirac semimetals*, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, 30th of January 2014.
- *El grafeno como teoría de fermiones relativistas en dos dimensiones*, part of the "XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia", IEM-CSIC, 11th of April 2014.

J. Fernando Barbero González

- *Geometric constraint algorithms for field theories with boundaries*, Instituto de Ciencias Matemáticas, CSIC, Madrid, 21st of March 2014.
- *Teoría cuántica de campos y gravedad cuántica*, part of the "XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia", IEM-CSIC, 11th of April 2014.
- *Bivariate generating functions for a class of linear recurrences*, Instituto de Ciencias Matemáticas, CSIC, Madrid, 23rd of May 2014.
- *Boundary Hilbert spaces in QFT: a case study*. Universidad de Burgos, Burgos, 3rd of November 2014.

Guillermo A. Mena Marugán

- *Gravedad y Cosmología Cuánticas de Lazos*, Universidad Andrés Bello, Santiago de Chile, Chile, 9th of September 2014.
- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology*, Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile, 11th of September 2014.
- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology: Mukhanov-Sasaki Equations*, Beijing Normal University, Beijing, China, 30th of October 2014.
- *Fock Quantization in Cosmology and Signature Change*, Fudan University, Shanghai, China, 31st of October 2014.
- *Mukhanov-Sasaki Equations in Loop Quantum Cosmology*, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan, 7th of November 2014.

Gianluca Calcagni

- *Quantum cosmology and gravity*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 20th of March 2014.
- *Quantum cosmology and gravity*, Universidad Complutense, Madrid, 6th of May 2014.

Jordi Mur Petit

- *Quantum Technologies with Cold Molecules: Measurement, Control, and Simulation*, Universität Hannover, Hanover, Germany, 24th of March 2014.
- *Física atómica a temperaturas ultrabajas: Computación, Simulación y Metrología Cuánticas*, part of the "XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia", IEM-CSIC, 11th of April 2014.

- *Quantum sensing with trapped ions: Two applications to the ultrafast and the ultracold*, Universität Innsbruck, Innsbruck, Austria, 22th of September 2014.
- *Quantum technologies with cold polar molecules and molecular ions*, ICFO-The Institute of Photonic Sciences, Castelldefels, Spain, 14th of November 2014.

Laura Castelló Gomar

- *A Unique Fock Quantization for Scalar Fields in Cosmologies with Signature Change*, Tokyo University of Science, Tokyo, Japan, 7th of November 2014.

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

Santiago Sánchez Cortés

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.
- *Raman and Surface-Enhanced Optical Spectroscopy*, Summer School on Biophotonics, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 28th of May 2014.
- *Coordinator of the Summer School of Biospectroscopy*, Residencia de la Universidad de Zaragoza, Jaca (Huesca), 24th-27th of June 2014.
- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy: Molecular Detection and Bioanalysis*, Universidade de Sao Paulo, Brazil, 14th November 2014.

Carlos Cabrillo García

- *La Física de la Materia Desordenada*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Pedro Carmona Hernández

- *Aplicaciones biológicas de la espectroscopía vibracional*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

José A. Sánchez Gil

- *Nanofotónica y Metamateriales en el IEM*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 10th of April 2014.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Química del Cemento “Tomás Vázquez”*- Curso Posgrado CSIC, Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja”, Madrid, 12th-21st of February 2014.

José Sánchez del Río

- *Viaje al interior de la materia*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Vicente Pesudo Fortes

- *Reacciones y estructura nuclear: investigación paso a paso*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 10th of April 2014.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

- *Cold plasmas and their applications to astrophysics* part of the “International School of Astrochemistry (Astrochemistry’s cool)”, Universidad Internacional Menéndez Pelayo (UIMP), Cuenca (Spain), 14th-18th of September 2014.

José M. Fernández Sánchez

- *Microchorros fluidos fuera del equilibrio*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Óscar Gálvez González

- *Hielos, agregados y plasmas de interés atmosférico y astrofísico*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Isabel Tanarro Onrubia

- *Low pressure H₂ plasmas: the Universe vs. the Lab*, Physikalisches Kolloquium, Ruhr-Universität Bochum (Germany), 20th of January 2014.
- *Plasmas fríos de hidrógeno: Universo vs. Laboratorio*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 26th of February 2014.
- *Plasmas fríos con alto contenido en Hidrógeno: Universo vs. Laboratorio*, Laboratorio Nacional de Fusión, CIEMAT, Madrid, 28th of March 2014.

Julio Fco. Santos Gómez

- *Control cuántico molecular*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Vicente Timón Salinero

- *Infrared Spectroscopy data of ices, solids and molecules*, 1st meeting of SSHADE France (IPAG, Grenoble), 5th-6th of February.
- *Modelización computacional de hielos, moléculas y filosilicatos*, part of the “XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9th of April 2014.

Francisco Colmenero Ruiz

- *Microscopic characterization of crystalline materials by theoretical methods*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 4th of July 2014.

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

- *Conferencia invitada (Introducción a la Nanolitografía con materiales poliméricos: fabricación, caracterización y aplicaciones)* en el Departamento de Física de la Materia Condensada. University of Zaragoza, Zaragoza, Spain, 6th-8th of February 2014.
- *Conferencia Invitada “Polymer structures and nanostructures: Physical properties from the macro- to the nanoscale”*. Department of “Acoustics and Thermal Physics Section” Leuven, (Belgium), 26th-28th of August 2014.
- *Conferencia Invitada “Nanostructuring Ferroelectric Polymers: Physical Implications And Potential Applications”* Centre for plastic electronics “Imperial College”. London, (U.K.), 10th-12th of December 2014.

Araceli Flores Aguilar-Amat

- *Nanoindentación en polímeros*, XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 10th of April 2014.

Juan Francisco Vega Borrego

- *Arquitectura molecular y reología de polímeros: experimentos, teoría y simulación computacional (Conferencia Invitada)* Universidad Rey Juan Carlos (URJC), Móstoles (Spain) 28th of May 2014.

Francisco José Baltá Calleja

- *SAXS studies of nanolayered polymercomposites influence of confinement*, Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V., Dresden (Germany), 3th-6th of July 2014.

Javier Ramos Díaz

- *Introducción a Materials Studio en la Investigación Química y de Ciencias de los Materiales*, Webminar (Addlink Software Científico), IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 27th of March 2014.
- *Mecánica y dinámica molecular con Forcite en Materials Studio*, Webminar (Addlink Software Científico), IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 28th of May 2014.
- *Herramientas mecano-cuánticas basadas en DFT para el estudio de moléculas y materiales en Materials Studio 7.0*, Webminar (Addlink Software Científico), IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 26th of June 2014
- *Herramientas computacionales para la modelización y simulación de polímeros en Materials Studio 7.0*, Webminar (Addlink Software Científico), IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 27th of November 2014

Juan Felipe Franco González

- *Simulaciones de dinámica molecular en macromoléculas biológicas*, XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 10th of April 2014.

Daniel E. Martínez Tong

- *Propiedades físicas de polímeros en la nanoescala*, XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 10th of April 2014.

Álvaro Rodríguez Rodríguez

- *Estudio de polímeros semiconductores mediante técnicas de luz sincrotrón*, XI Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 10th of April 2014.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS**5.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY****Jorge Dukelsky Bercovich**

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems*. Brasov, Rumania.
- Member of the Scientific Organizing Committee of the International Conference *Computational Challenges in Nuclear and Many-Body Physics*. Stockholm, Sweden.

José González Carmona

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Nanoscience and Nanotechnology 2014*. Frascati, Italy.

Jesús Fernando Barbero González

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops'15*. Erlangen, Germany.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XXIII International Fall workshop on Geometry and Physics*, Granada (Spain), 2nd-5th of September 2014.
- Associate Editor for the journal *General Relativity and Gravitation*.

Guillermo Antonio Mena Marugán

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *Loops'15*. Erlangen, Germany.

María Luisa Senent Díez

- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1401 "Our Astrochemical History".
- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1405 "MOLIM".

Gianluca Calcagni

- Organizer of the *2nd i-Link Workshop Macro-from-Micro: Quantum Gravity and Cosmology*. Madrid, 15th-18th of September 2014.
- Referee for several journals of physics published by APS (Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. D), IOP (JCAP, Class. Quantum Grav.), Springer (Eur. Phys. J. C, Eur. Phys. J. Plus).

Jordi Mur Petit

- Review Editor for scientific journal *Frontiers in Physics*, Switzerland.

5.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY**Francisco Javier Bermejo**

- Member of the Editorial Board of the *Physical Review Letters* (Divisional Associate Editor in Condensed Matter Physics).

Carlos Cabrillo García

- Member of Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FAP2) of the *ISIS Pulsed Neutron & Muon Source*.

José Antonio Sánchez Gil

- Member of the Scientific Committee of the *Conferencia Española de Nanofotónica 2014*, Santander (Spain).

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Dionisio Bermejo Plaza**

- Member of the International Advisory Committee of the *International Conference on Spectral Line Shapes*.
- Member of the International Steering Committee of the *European Conference on Non-linear Optics (ECONOS)*.
- Member of the International Advisory Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.
- Adjunct Profesor in the Department of Physics and Astronomy at the *University of Lethbridge*, Lethbridge, Canadá.

Víctor José Herrero

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Vicepresident of the board of the Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) of the *Real Sociedad Española de Física (RSEF)* (Spain).
- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*
- Member of the International Advisory Committee of the *13th European Vacuum Conference ECV13*
- Chairperson of the Organizing Committee of the 3PC Workshop: “Cold Plasmas and Astrochemistry: Gas and Dust (International), Madrid, Spain, 7-8th of July 2014.

Salvador Montero Martín

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

José Luis Doménech Martínez

- Member of the International Advisory Committee of the *International Symposium on Molecular Spectroscopy*

Isabel Tanarro Onrubia

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Member of the board of the “Grupo de Plasmas” of the *Real Sociedad Española de Física* (Spain).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG)*. Period 2012-2016.
- Co-chairperson of the Organizing Committee of the 3PC Workshop: “Cold Plasmas and Astrochemistry: Gas and Dust (International), Madrid, Spain, 7-8th of July 2014.

Belén Maté Naya

- President of the “Comité de Espectroscopia” of the *Sociedad Española de Optica- SEDOPTICA* (Spain).

Vicente Timón Salinero

- Member of the board of the *Sociedad Española de Mineralogía (SEM)* (Spain)

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

- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana

- 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”.
- *Assistant Editor* of the journal “e-Polymer”.

Aurora Nogales Ruiz

- Member for Science Europe Research Infrastructures Working Group
- Member of the Facility Access Panel 5 from the ISIS Neutron Source, Rutherford Appleton Laboratory, UK

Araceli Flores Aguilar-Amat

- Member of the Scientific Committee of the international polymer group POLYCHAR (<http://www.unt.edu/POLYCHAR>).

Mari Cruz García Gutiérrez

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.
- President of the Executive Board of the *Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE)*, since September 2013 (<http://auseweb.wordpress.com/junta-de-gobierno/>).
- Spanish delegate of the *European Synchrotron Users Organization (ESUO)*, since January 2010 (<http://www.esuo.org/?node=delegatesAndObservers>).
- Member of Editorial Board of the journal "*ISRN Nanomaterials*" since March 2012.
- Senior Editor of the "Journal of Nanoscience Letters" since June 2014.

Juan Francisco Vega Borrego

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of *Real Sociedad Española de Química (RSEQ)*.

5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH **ACTIVITIES AND MATERIAL**

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

José González Carmona

Nanociencia del carbono: fullerenos, nanotubos y grafeno.
 Charla divulgativa - XIV Semana de la Ciencia - CSIC.
 Madrid.
 5th of November 2014

Jesús Fernando Barbero González

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Las Rozas (Las Rozas, Madrid)
 10th of February 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Beatriz Galindo (Madrid)
 11th of February 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Ciudad de los Poetas (Madrid)
 12th of February 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. San Mateo (Madrid)
 3rd of March 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Cañada Real, Galapagar (Madrid)
 10th of March 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Manuel de Falla, Coslada (Madrid)
 11th of March 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
 I.E.S. Julio Caro Baroja, Fuenlabrada (Madrid)
 14th of March 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
I.E.S. Mirasierra (Madrid)
18th of March 2014.

Outreach talk: ¿Qué es la relatividad?
I.E.S. Velázquez, Móstoles (Madrid)
16th of May 2014.

Outreach talk: ¿Qué es la relatividad?
Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Semana de la Ciencia 2014
7th of November 2014.

Outreach talk: ¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Semana de la Ciencia 2014
11th of November 2014.

Outreach talk: Materiales Asombrosos
I.E.S. Satafi, Getafe (Madrid)
18th of December 2014.

Guillermo A. Mena Marugán

Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos
Charla divulgativa – Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas, UPM.
Madrid.
15 Diciembre 2014.

Rafael Alejandro Molina Fernández

Caos: un nuevo paradigma científico.
Charla divulgativa - XIV Semana de la Ciencia - CSIC.
Madrid.
5 Noviembre 2014

Jordi Mur Petit

Física 2013
Book chapter, in "Anuari 2013" by Enciclopèdia Catalana, S.A., Barcelona, 2014.
ISBN 978-84-412-2267-0, Legal deposit: B-1298-2014

Luis Javier Garay Elizondo

II Semana de la ciencia indignada.
Charla divulgativa: El tiempo en pedazos.
Facultad de Físicas, UCM.
11th of December 2014

Jornadas de Filocsmología.
Charla divulgativa: El tiempo en pedazos.
Centro cultural “la corrala”, Madrid.
9th of May 2014.

Óscar Moreno Díaz

El proyecto Marie Curie: Procesos electrodébiles en núcleos.
Charla en el Real Colegio Complutense en Harvard (institución conjunta de la Universidad de Harvard y la Universidad Complutense de Madrid).
Cambridge (USA).
29th of September 2014.

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

Santiago Sánchez Cortés

Visita de estudiantes a los laboratorios de “Espectroscopia y Preparación de Muestras”--IEM.
Programa educativo “4ºESO-Empresa”---Comunidad de Madrid.
7-10 Abril 2014.

José Vicente García Ramos

Obra de teatro “Todo x la Ciencia: Siete conversaciones ideadas, posibles e irreales y un monólogo que nunca ha sido”. (Director-Actor-Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos).

Grupo TeatrIEM

- Centro Cívico “Viñagrande”, Alcorcón, Madrid, enero 2014.

- Residencia de Estudiantes, Madrid, marzo 2014.

Obra de teatro “Discronía” de José Sanchís Sinisterra. Charla con el Director J. Vicente García-Ramos.
II Ciclo de Filocsmología. Tiempo al tiempo.

Centro Cultural “La Corrala”- Universidad Autónoma de Madrid.

Mayo 2104

Presentación del libro “Qué sabemos de... Las Moléculas: cuando la luz te ayuda a vibrar”. Autor: J. Vicente García Ramos. Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata.

Feria del Libro de Madrid.

Parque del Retiro, Madrid.

Junio 2014

Obra de teatro “Científicas ab initio: Pioneras, intrusas y únicas” representada por el Grupo TeatrIEM.
(Director, Actor, Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos).

XIV Semana de la Ciencia-- Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales.

Museo de Ciencias Naturales, Madrid (3 representaciones, una de ellas para estudiantes de Secundaria).

Noviembre 2014.

Carlos Cabrillo García

Taller “Ondas por todas partes”.

Charlando con nuestros sabios-- Ciclo de talleres del Museo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Museo Nacional de Ciencia y Tecnología, Paseo de las Delicias 61, Madrid.

8 de marzo 2014.

Luis Díaz Sol

Visita al Laboratorio de plasmas de ablación.

XIV Semana de la Ciencia--CSIC-CAM.

Instituto de Estructura de la Materia.

3-16 noviembre 2014.

Sagrario Martínez Ramírez

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”

XIV Semana de la Ciencia---CSIC-CAM.

Colegio Arquitecto Gaudí, Madrid---3 de noviembre 2014.

Colegio Santa María La Blanca, Montecarmelo, Madrid---6 and 7 de noviembre 2014.

Universidad Camilo José Cela, Madrid---19 de noviembre 2014.

Charla “Patrimonio y Espectroscopia”

Programa Educativo “4ºESO-Empresa” ---Comunidad de Madrid.

7-10 Abril 2014.

José Sánchez del Río

Charla “Viaje al interior de la materia”.

Ciclo de Charlas en IES---CPAN.

- IES Profesor Julio Pérez, Rivas-Vaciamadrid, Madrid, 22 de enero de 2014.

- IES La Senda, Madrid, 11 de febrero de 2014.

- IES Juan de Herrera, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, 21 de mayo de 2014.

Diego Romero Abujetas

Actor en la obra de teatro “Científicas ab initio: Pioneras, intrusas y únicas” del Grupo TeatrIEM. Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos.

XIV Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) & Museo de C.C. Naturales, Madrid (3 representaciones, una de ellas para estudiantes de Secundaria).

Noviembre 2014.

Enrique Nácher González

Organizador externo invitado.

NUSTAR Week 2014 (Congreso)

Valencia, España

22-26 septiembre 2014.

Organizador local.

15th AGATA Week (Meeting)

GANIL, Francia

18-20 noviembre 2014.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga**

La Química del Cosmos (conferencia)

XIV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC.

12th Noviembre 2014.

José M^a Fernández Sánchez, Guzmán Tejeda Gala, y Elena Moreno Atahonero

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular

(Conference and guided visit to students of 2º Bachillerato of Colegio Arturo Soria de Madrid).

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid

23rd May 2014.

Isabel Tanarro Onrubia

Guided visit to the Laboratorio de Plasmas Fríos

XI Curso de Iniciación a la Investigación en el Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid.

9th April 2014.

Plasma, el cuarto estado de la materia

Conference and guided visit to students of 2º Bachillerato of Cooperativa de Enseñanza Arturo Soria

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

23th May 2014.

Tutorial, interview and guided visit to the Laboratorio de Plasmas Fríos

To the student Helena Ren for her research work of 2º Bachillerato “L’Univers del Plasma” in the Institut Emperador Carles, Barcelona

25th March to 11th December 2014

Óscar Gálvez González.

Hielo en el Universo: de la Tierra al Medio Interestelar

XIV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC.

12th November 2014.

¿Qué es la química cuántica y para qué sirve?

XIV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC.

11th November 2014.

Teatro Científico: *Todo x la Ciencia*

XIV Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC.

13th-16th November 2014.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Mari Cruz García Gutiérrez

Actriz y ayudante de dirección en “Científicas “*ab initio*”: Pioneras, intrusas y únicas”. (Montaje y dramaturgia: J.V. García-Ramos).

Teatro científico—Semana de la Ciencia

Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, José Abascal 9, Madrid

14th of November 2014, 12:45 (para escolares) y 19:00, 15th of November 2014, 16th of Noviembre 2014.

Javier Ramos Díaz

Introducción a materials Studio en la Investigación Química y de Ciencia de los Materiales.

Webminar (Addlink Software Científico).

<http://digital.csic.es/handle/10261/96382>

8th May 2014.

Mecánica y dinámica molecular con Forcite en Materials Studio.

Webminar (Addlink Software Científico).

<http://digital.csic.es/handle/10261/97724>

4th June 2014.

Herramientas mecano-cuánticas basadas en DFT para el estudio de moléculas y materiales en Materials Studio 7.0.

Webminar (Addlink Software Científico).

<http://digital.csic.es/handle/10261/108172>

28th November 2014.

Herramientas computacionales para la modelización y simulación de polímeros en Materials Studio 7.0

Webminar (Addlink Software Científico).

<http://digital.csic.es/handle/10261/108171>

28th November 2014.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Informes de transferencia tecnológica

J.F. Vega, R. Nuñez-Ramírez and J. Martínez-Salazar

Determination of the absolute molecular weight of Hyaluronic Acid by means of Gel Permeation Chromatography and Tetradetection.

Laboratorio Rubió, Tarragona, Spain (September 2014).

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

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

Jesús Fernando Barbero González

- Group of *Teorías de Campos y Física Estadística*, Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany, University of Carlos III, Madrid, Associated Unit at IEM-CSIC. The Members of the IEM participating are: Jesús Fernando Barbero González and José González Carmona. The members of the University of Carlos III participating are: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor, Jesús Salas Martínez, Luis Francisco López Bonilla y Manuel Carretero Cerrajero.

Jorge Dukelsky Bercovich

- Department of Física Atómica, Molecular y Nuclear, University of Sevilla, Associated Unit at CSIC. (Responsible: José Miguel Arias)

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

Unidades Asociadas / Associated Units:**Santiago Sánchez Cortés.**

- Group of "Spectroscopy and Molecular Structure" (Department of Physical Chemistry), University of Malaga (responsible: Juan Carlos Otero), Associated Unit at CSIC.

Otras actividades / Other activities:**Juana Bellanato Fontecha.**

- Attendance to the International Committee Meeting held at EUCMOS XXXII, Düsseldorf (Germany), on 25 August 2014
- Member of the International Committee of the *European Congresses on Molecular Spectroscopy* (EUCMOS).

José Vicente García Ramos.

- Member of the Jury of the FBBVA-RSEF Awards on Physics Outreach. November 2014.

Sagrario Martínez Ramírez.

- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN05/CTN-80. Cales.
- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80: Cementos y cales.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:**Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga**

- "Molecular Physical Chemistry", comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC (Víctor J. Herrero) and Dpto. Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (F. Javier Aoiz), renewed for 2012-2015.

Otras actividades / Other activities:**Dionisio Bermejo**

- Groupe de recherche international (GDRI), HiResMIR (High Resolution Microwave, Infrared and Raman molecular spectroscopy for atmospheric, planetologic and astrophysical applications)

Vicente Timón Salinero

- Stay at the Centro de Supercomputación Gallego (CESGA), taking advantage of the center's computational resources to study, by means of simulation, the CO₂ absorption capability of several materials.

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities:**Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:**

- Measurements in the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 27th of January 2014.

Aurora Nogales Ruíz. Short stays:

- Attendance as a member thesis committee of Doña Laura Jiménez Romasanta. Bilbao, Spain, 23th of January 2014.

- Attendance to the VII Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas. Pamplona, Spain, 22-25th of June 2014.
- Attendance as a member thesis committee of Don Bran Vanroy. University KU Leuven. Belgium, 26-28th of August 2014.
- Attendance to the “Facility Access Panel Meeting” de la Fuente de espalación de neutrones ISIS. London, U.K, 10-12th of December 2014.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 20- 25th of November 2014.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- Attendance to the Workshop “Presentation of fase III beamlines for ALBA Synchrotron”. Barcelona, Spain, 10th of April 2014.
- Participation in the Scientific Advisory Committee meeting of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 30th of June-2th of July 2014.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26), Grenoble, France, 20-25th of November 2014.
- Participation as Spanish Delegate in the ESRF Council. Grenoble, France, 1-2nd of December 2014.
- Participation in the Scientific Advisory Committee meeting of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 3-4th of December 2014.

Juan Francisco Vega Borrego. Short stays:

- Panel member for the Ph.D. dissertation “High-performance conductive polyurethane adhesive by filling carbon nanotubes. Electrical. Thermal and rheological characterization” by Mrs. Maite Landa Albors, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU), Donostia-San Sebastián, Spain, 16th of December 2014.

TEM-BIOPHYM facility

- In the transmission electron microscopy installation is carried out support to the research of other research groups both of the IEM as other centers such as the Institute of Chemical Physics Rocasolano (IQFR) and the Institute of Science and Technology of Polymers (ICTP), as well as an important part of the scientific activity of the BIOPHYM.
- There is a large group of users, associated through the web page of the BIOPHYM group, with which periodic meetings are held (<http://www.gemppo.iem.csic.es/tem/>).
- The results of these tasks have resulted in 16 scientific publications in the past four years, as well as several presentations at national and international conferences. Additionally, the results are part of the research projects that are developed in several p.H.D. Thesis.

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

CHAPTER 6
PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION

6.1 PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI / ISI PUBLICATIONS

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

1. M. Al-Mogren, O.Denis-Alpizar, D. Ben Abdallah, T.Stoecklin, P.Halvick, M.L.Senent and Majdi Hochlaf.
On the use of explicitly correlated treatment methods for the generation of accurate polyatomic – He/H₂ interaction potential energy surfaces: The case of C₃ – He complex and generalization.
Journal of Chemical Physics **141**, 044308 (2014).
2. A. Alonso-Serrano, L.J. Garay and G. A. Mena Marugán.
Correlations across Horizons in Quantum Cosmology.
Physical Review D **90**, 124074 (2014).
3. J. F. Barbero G, J. Prieto and E. J. S. Villaseñor.
Hamiltonian treatment of linear field theories in the presence of boundaries: A geometric approach.
Classical and Quantum Gravity, **31**, 4 (2014)
4. J. F. Barbero G., J. Prieto and E. J. S. Villaseñor.
Hamiltonian treatment of linear field theories in the presence of boundaries: a geometric approach.
Classical and Quantum Gravity **31**, 045021 (2014). Selected as one of the journal *Highlights of 2013-2014* in quantum gravity.
5. J. F. Barbero G., J. Salas and E.J S. Villaseñor.
Bivariate Generating Functions for a Class of Linear Recurrences: General Structure.
Journal of Combinatorial Theory, Series A **125**, 146 (2014).
6. J. F. Barbero G., T. Pawłowski and E.J S. Villaseñor.
Separable Hilbert space for loop quantization.
Physical Review D **90**, 067505 (2014).
7. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, L.J. Garay and Gil Jannes.
Electromagnetism as an Emergent Phenomenon: A Step-by-Step Guide.
New Journal of Physics **16**, 123028 (2014).
8. C. Barceló; R. Carballo-Rubio and L.J. Garay.
Mutiny at the White-Hole District.
International Journal of Modern Physics D **23**, 1442022 (2014).
9. C. Barceló; R. Carballo-Rubio and L.J. Garay.
Unimodular Gravity and General Relativity from Graviton Self-Interactions.
Physical Review D **89**, 124019 (2014).
10. I. W. Bulik, G. E. Scuseria and J. Dukelsky.
Density matrix embedding from broken symmetry lattice mean fields.
Physical Review B **89**, 035140 (2014).
11. A. Cadarso, J. Mur-Petit, and J.J. Garcia-Ripoll.
Phase stabilization of a frequency comb using multi-pulse quantum interferometry.
Physical Review Letters. **112**, 073603 (2014).
12. G. Calcagni, J. Magueijo and D. Rodríguez Fernández.
Varying electric charge in multi-scale spacetimes.
Physical Review D **89**, 024021 (2014).

13. G. Calcagni and G. Nardelli.
Quantum field theory with varying couplings.
International Journal of Modern Physics A **29**, 1450012 (2014).
14. G. Calcagni, L. Modesto and P. Nicolini.
Super-accelerating bouncing cosmology in asymptotically-free non-local gravity.
European Physical Journal C **74**, 2999 (2014).
15. G. Calcagni and L. Modesto.
Nonlocality in string theory.
Journal of Physics A **47**, 355402 (2014).
16. G. Calcagni, S. Kuroyanagi, J. Ohashi and S. Tsujikawa.
Strong Planck constraints on braneworld and non-commutative inflation.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1403**, 052 (2014).
17. G. Calcagni, D. Oriti and J. Thürigen.
Spectral dimension of quantum geometries.
Classical and Quantum Gravity **31**, 135014 (2014).
18. G. Calcagni, C. Kiefer and C.F. Steinwachs.
Quantum cosmological consistency condition for inflation.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1410**, 026 (2014).
19. G. Calcagni.
Loop quantum cosmology from group field theory.
Physical Review D **90**, 064047 (2014).
20. M. Carvajal, M.L.Senent, M.Villa and R.Domínguez-Gómez.
Vibrational energies for monodeuterated dimethyl ether based on high level ab initio potential energy surfaces.
Chemical Physics Letters **592**, 200 (2014).
21. L. Castelló Gomar, M. Fernández-Méndez, J. Olmedo and G. A. Mena Marugán.
Cosmological Perturbations in Hybrid Loop Quantum Cosmology: Mukhanov-Sasaki Variables.
Physical Review D **90**, 064015 (2014).
22. L. Castelló Gomar and G. A. Mena Marugán.
Uniqueness of the Fock Quantization of Scalar Fields and Processes with Signature Change in Cosmology.
Physical Review D **89**, 084052 (2014).
23. R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov and A.S. Jensen.
Production of ^6He and ^9Be by radiative capture and four-body recombination.
European Physical Journal A **50**, 93 (2014).
24. J. Dukelsky.
Exactly solvable pairing models in nuclear and mesoscopic physics.
Journal of Physics: Conference Series **533**, 012057 (2014).
25. V. Fernández-Hurtado, J. Mur-Petit, J.J. Garcia-Ripoll and R. A. Molina.
Lattice scars: Surviving in an open discrete billiard.
New Journal of Physics **116**, 035005 (2014).
26. M. Fernández-Méndez, G. A. Mena Marugán and J. Olmedo.
Effective Dynamics of Scalar Perturbations in a Flat Friedmann-Robertson-Walker Spacetime in Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **89**, 044041(2014).

27. M. Fernández-Méndez, G. A. Mena Marugán, and J. Olmedo.
Loop Quantum Cosmological Perturbations.
Journal of Physics Conference Series **490**, 012152 (2014).
28. Y. Fujita, H. Fujita, T. Adachi, C.L. Bai, A. Algora, G.P.A. Berg, P. von Brentano, G. Colò, M. Csatlós, J.M. Deaven, E. Estevez-Aguado, C. Fransen, D. De Frenne, K. Fujita, E. Ganioglu, C. J. Guess, J. Gulyás, K. Hatanaka, K. Hirota, M. Honma, D. Ishikawa, E. Jacobs, A. Krasznahorkay, H. Matsubara, K. Matsuyanagi, R. Meharchand, F. Molina, K. Muto, K. Nakanishi, A. Negret, H. Okamura, H. J. Ong, T. Otsuka, N. Pietralla, G. Perdikakis, L. Popescu, B. Rubio, H. Sagawa, P. Sarriguren, C. Scholl, Y. Shimbara, Y. Shimizu, G. Susoy, T. Suzuki, Y. Tameshige, A. Tamii, J. H. Thies, M. Uchida, T. Wakasa, M. Yosoi, R.G.T. Zegers, K.O. Zell, J. Zenihiro.
Observation of Low- and High-Energy Gamow-Teller Phonon Excitations in Nuclei.
Physical Review Letters **112**, 112502 (2014).
29. M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov and E. Moya de Guerra.
Ground-state properties and symmetry energy of neutron-rich and neutron-deficient Mg isotopes.
Physical Review C **89**, 064302 (2014).
30. M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov and E. Moya de Guerra.
Symmetry Energy and Structure of Exotic Nuclei.
Journal of Physics Conference Series **533**, 012016 (2014).
31. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra.
Symmetry Energy and Surface Properties of Neutron-Rich Exotic Nuclei.
AIP Conference Proceedings **1606**, 180 (2014).
32. L.J. Garay, M. Martín-Benito and E. Martín-Martínez.
Echo of the Quantum Bounce.
Physical Review D **89**, 043510 (2014).
33. J.E. García-Ramos, J.M. Arias and J. Dukelsky.
Disentangling phase transitions and critical points in the proton-neutron interacting boson model by catastrophe theory.
Physics Letters B **736**, 333 (2014).
34. E. Garrido, A.S. Jensen and D.V. Fedorov.
Techniques to treat the continuum applied to electromagnetic transitions in ^8Be .
Few-body Systems **55**, 101 (2014).
35. E. Garrido, A. Kievsky and M. Viviani.
Breakup of three particles within the adiabatic expansion method.
Physical Review C **90**, 014607 (2014).
36. E. Garrido, A.S. Jensen and D.V. Fedorov.
Transitions between rotational nuclear few-body states in the continuum.
Few-body Systems **55**, 869 (2014).
37. E. Garrido, A.S. Jensen and D.V. Fedorov.
Rotational character of the ^8Be and ^{12}C spectra investigated through inelastic cross sections via photon.
Journal of Physics: Conference Series **569**, 012064 (2014).
38. J. González.
Marginal Fermi liquid versus excitonic instability in 3D Dirac semimetals.
Physical Review B **90**, 121107(R) (2014).
39. J. González.
Rippling transition from electron-induced condensation of curvature field in graphene.
Physical Review B **90**, 165402 (2014).

40. E. Grodner, A. Gadea, P. Sarriguren, S.M. Lenzi, J. Grebosz, J.J. Valiente-Dobón, A. Algora, M. Górska, P.H. Regan, D. Rudolph, G. de Angelis, J. Agramunt, N. Alkhomashi, L. Amon Susam, D. Bazzacco, J. Benlliure, G. Benzoni, P. Boutachkov, A. Bracco, L. Caceres, R. B. Cakirli, F.C.L. Crespi, C. Domingo-Pardo, M. Doncel, Zs. Dombrádi, P. Doornenbal, E. Farnea, E. Ganioglu, W. Gelletly, J. Gerl, A. Gottardo, T. Huyuk, N. Kurz, S. Leoni, D. Mengoni, F. Molina, A.I. Morales, R. Orlandi, Y. Oktem, R.D. Page, D. Perez, S. Pietri, Zs. Podolyák, A. Poves, B. Quintana, S. Rinta-Antila, B. Rubio, B.S. Nara Singh, A.N. Steer, R. Wadsworth, O. Wieland, and H. J. Wollersheim.
Hindered Gamow-Teller decay to the Odd-Odd $N=Z$ ^{62}Ga : Absence of Proton-Neutron $T=0$ Condensate in $A=62$.
Physical Review Letters **113**, 092501 (2014).
41. J. Henderson, D.G. Jenkins, K. Kaneko, P. Ruotsalainen, P. Sarriguren, K. Auranen, M.A. Bentley, P.J. Davies, A. Górgen, T. Grahn, P. T. Greenlees, A. Hay, T.W. Henry, A. Herzán, U. Jakobsson, R. Julin, S. Juutinen, J. Konki, M. Leino, C. McPeake, S. Milne, A.J. Nichols, J. Pakarinen, P. Papadakis, J. Partanen, P. Peura, P. Rahkila, E. Sahin, M. Sandzelius, J. Sarén, C. Scholey, M. Siciliano, L. Sinclair, J. Sorri, S. Stolze, J. Uusitalo, R. Wadsworth and M. Zielinska.
Spectroscopy on the proton drip-line: Probing the structure dependence of isospin nonconserving interactions.
Physical Review C **90**, 051303(R) (2014).
42. T. M. Henderson, G. E. Scuseria, J. Dukelsky, A. Signoracci and T. Duguet.
Quasiparticle coupled cluster theory for pairing interactions.
Physical Review C **89**, 054305 (2014).
43. D. Hove, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, A.S. Jensen, K. Riisager, N.T. Zinner and E. Garrido.
Borromean structures in medium-heavy nuclei.
Physical Review C **90**, 064311 (2014).
44. D. Hueraga, J. Dukelsky, N. Laflorencie and G. Ortiz.
Chiral phases of two-dimensional hard-core bosons with frustrated ring exchange.
Physical Review B **89**, 094401 (2014).
45. A. Kievsky, M. Viviani, M. Gattobigio, C. Romero-Redondo and E. Garrido.
Structure and dynamics of few-helium clusters using soft-core potentials.
Physics of Atomic Nuclei **77**, 463 (2014).
46. A. Kievsky, M. Gattobigio and E. Garrido.
Universality in few-body systems: from few-atoms to few-nucleons.
Journal of Physics: Conference Series **527**, 012001 (2014).
47. S. Lerma H and J. Dukelsky.
The Lipkin-Meshkov-Glick model from the perspective of the $SU(1,1)$ Richardson-Gaudin models.
Journal of Physics: Conference Series **492**, 012013 (2014).
48. J. Margalef-Bentabol and Eduardo J. S. Villaseñor.
Topology of the Misner Space and its g -boundary.
General Relativity and Gravitation **46**, 1755 (2014).
49. M. Martín-Benito, D. Martín-de Blas and G.A. Mena Marugán.
Approximation Methods in Loop Quantum Cosmology: From Gowdy Cosmologies to Inhomogeneous Models in Friedmann-Robertson-Walker Geometries.
Classical and Quantum Gravity **31**, 075022 (2014).
50. J. Mur-Petit and J.J. Garcia-Ripoll.
Collective modes of a trapped ion-dipole system.
Applied Physics B: Lasers and Optics **114**, 283 (2014).

51. J. Mur-Petit and R. A. Molina.
Chiral bound states in the continuum.
Physical Review B **90**, 035434 (2014).
52. R. Navarro Pérez, E. Garrido, J.E. Amaro and E. Ruiz Arriola.
Triton binding energy with realistic statistical uncertainties.
Physical Review C **90**, 047001 (2014).
53. G. Ortiz, J. Dukelsky, E. Cobanera, C. Eсеbbag and C. Beenakker.
Many-Body Characterization of Particle-Conserving Topological Superfluids.
Physical Review Letters **113**, 267002 (2014).
54. C. Puzzarini, M.L.Senent, R. Domínguez-Gómez, M. Carvajal and M. al Mogreen.
Accurate spectroscopic characterization of ethyl mercaptan and dimethyl sulfide isotopologues: a route toward their astrophysical detection.
Astrophysical Journal **796**, 50 (2014).
55. A. Relaño, J. Dukelsky, P. Pérez-Fernández and J. M. Arias.
Quantum phase transitions of atom-molecule Bose mixtures in a double-well potential.
Physical Review E **90**, 042139 (2014).
56. N. Sandulescu, D. Negrea, J. Dukelsky and C. W. Johnson.
Proton-neutron pairing and alpha-type quartet condensation in nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **533**, 012018 (2014).
57. P. Sarriguren.
Weak decay rates of pf-shell nuclei in stellar scenarios.
Journal of Physics Conference Series **533**, 012011 (2014).
58. P. Sarriguren, A. Algora and J. Pereira.
Gamow-Teller response in deformed even and odd neutron-rich Zr and Mo isotopes.
Physical Review C **89**, 034311 (2014).
59. M.L. Senent, C.Puzzarini, R.Domínguez-Gómez, M.Carvajal and M.Hochlaf.
Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of detectable sulfur-organic compounds: ethyl mercaptan and dimethyl sulfide.
Journal of Chemical Physics **140**, 124302 (2014).
60. M.L. Senent, C.Puzzarini, M.Hochlaf, R.Domínguez-Gómez and M.Carvajal.
Theoretical spectroscopic characterization at low temperatures of S-methyl thioformate and O-methyl thioformate.
Journal of Chemical Physics **141**, 104303 (2014).
61. J. Zhao, C. A. Jimenez-Hoyos, G. E. Scuseria, D. Huerga, J. Dukelsky, S. M. A. Rombouts and G. Ortiz.
Composite fermion-boson mapping for fermionic lattice models.
Journal of Physics: Condensed Matter **26**, 455601 (2014).

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

62. S.G. Altstadt, T. Adachi, Y. Aksyutina, J. Alcantara, H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, L. Atar, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Barr, S. Beceiro, D. Bemmerer, J. Benlliure, C.A. Bertulani, K. Boretzky, M.J.G. Borge, G. Burgunder, M. Caamano, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkäll, S. Chakraborty, M. Chartier, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, P. Díaz Fernández, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estrade, F. Farinon, L.M. Fraile, M. Freer, M. Freudenberger, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhäuser, K. Göbel, P. Golubev, D. Gonzalez Diaz, J. Hagdahl, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, M. Holl, J.D. Holt, G. Ickert, A. Ignatov, B. Jakobsson, H.T. Johansson, B. Jonson, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A.Kelic-Heil, R. Knöbel, T. Kröll, R. Krücken, J. Kurcewicz,

- N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, O. Lepyoshkina, J. Machado, J. Marganec, V. Maroussov, J. Menéndez, M. Mostazo, A. Movsesyan, M.A. Najafi, T. Nilsson, C. Nociforo, V. Panin, A. Perea, S. Pietri, R. Plag, A. Prochazka, A. Rahaman, G. Rastrepina, R. Reifarh, G. Ribeiro, M.V. Ricciardi, C. Rigollet, K. Riisager, M. Röder, D. Rossi, J. Sanchez del Rio, D. Savran, H. Scheit, A. Schwenk, H. Simon, J. Simonis, K. Sonnabend, O. Sorlin, V. Stoica, B. Streicher, J. Taylor, O. Tengblad, S. Terashima, R. Thies, Y. Togano, E. Uberseder, J. Van de Walle, P. Velho, V. Volkov, A. Wagner, F. Wamers, H. Weick, M. Weigand, C. Wheldon, G. Wilson, C. Wimmer, J.S. Winfield, P. Woods, D. Yakorev, M.V. Zhukov, A. Zilges, and M. Zoric, K. Zuber.
^{13,14}B(*n*, γ) via Coulomb Dissociation for Nucleosynthesis towards the *r*-Process.
 Nuclear Data Sheets **120**, pp. 197-200 (2014).
63. H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, T. Aumann, D. Bertini, P. Cabanelas, E. Casarejos, J. Cederkall, D. Cortina-Gil, P. Díaz Fernández, I. Duran, E. Fiori, D. Galaviz, M. Labiche, E. Nacher, B. Pietras, D. Savran, O. Tengblad, P. Teubig.
Performance analysis for the CALIFA Barrel calorimeter of the R³B experiment.
 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **767**, pp. 453-466 (2014).
64. G. Baraldi, E. Lopez-Tobar, K. Hara, S. Sanchez-Cortes and J. Gonzalo.
Probing Plasmonic Effects on the Raman Activity of Ag Nanoparticle-Based Nanostructures through Terphenyl Diisocyanide Adsorption.
 Journal of Physical Chemistry C **118** -9, pp. 4680-4686 (2014).
65. J.A. Briz, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Algora and B. Rubio.
Beta decay studies of the N=Z and waiting point nucleus ⁷²Kr.
 INPC 2013 -International Nuclear Physics Conference, Vol. 1
 EPJ Web of Conferences Volume **66**, p. 02016 (2014).
 ISBN: 978-2-7598-1175-5
 ISSN: 2100-014X
66. S. Bönig, S. Ilieva, T. Kröll, M. Scheck, D. Balabanski, C. Bauer, A. Blazhev, T. Bloch, D. Deleanu, J. Diriken, P. Fernier, R. Gernhäuser, K. Hadynska-Klek, A. Jungclaus, R. Lutter, A. Negret, K. Nowak, R. Orlandi, J. Pakarinen, G. Rainovski, T.R. Rodriguez, M.V. Schmid, M. Seidlitz, B. Siebeck, G.S. Simpson, A.I. Sisón, R. Stegmann, T. Stora, P.G. Thirolf, M. Thürauf, M.J. Vermeulen, D. Voulot, N. Warr, F. Wenander, H.D. Witte.
Quadrupole collectivity in neutron-rich Cd isotopes.
 EPJ Web of Conferences, Vol. **66**, p. 02012(2014).
 ISSN: 2100-014X.
 ISBN: 978-2-7598-1175-5.
67. M.V. Cañamares, D.A. Reagam, J.R. Lombardi and M. Leona.
TLC-SERS of mauve, the first synthetic dye.
 Journal of Raman Spectroscopy **45**, pp.1147-1152 (2014).
68. M. Carmona-Gallardo, A. Rojas, M.J.G. Borge, B. Davids, B.R. Fulton, M. Hass, B.S. Nara Singh, C. Ruiz and O. Tengblad.
³He(α , γ)⁷Be cross section measured using complementary techniques.
 INPC 2013 - International Nuclear Physics Conference, Vol. 2.
 EPJ Web of Conferences, Volume **66**, p. 07003 (2014).
 ISSN 2100-014X
 ISBN 978-2-7598-1176-2.
69. M. Careche, P. Carmona and I. Sánchez-Alonso.
Monitoring the Time and Temperature History of Frozen Hake (Merluccius merluccius, L.) Muscle by FTIR Spectroscopy of the Lipid Fraction.
 Food and Bioprocess Technology, **8** p.112 (2014).
70. D. Cortina-Gil, H. Alvarez-Pol, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Bendel, J. Benlliure, D. Bertini, A. Bezbakh, T. Bloch, M. Böhmer, M.J.G. Borge, J.A. Briz, P. Cabanelas, E. Casarejos, M. Carmona Gallardo, J. Cederkäll, L. Chulkov, M. Dierigl, D. Di Julio, I. Durán, E. Fiori, A. Fomichev, D. Galaviz, M. Gascón, R. Gernhäuser, J. Gerl, P. Golubev, M. Golovkov, D. González, A. Gorshkov, A. Heinz, M. Heil, W. Henning, G. Ickert, A. Ignatov, B. Jakobsson, H.T. Johansson, T. Kröll, R. Krücken, S. Krupko, N. Kurz, T.

- Le Bleis, B. Löher, E. Nacher, T. Nilsson, C. Parrilla, A. Perea, N. Pietralla, B. Pietras, R. Reifarth, J. Sanchez del Rio, D. Savran, S. Sidorchuk, H. Simon, L. Schnorrenberger, O. Tengblad, P. Teubig, R. Thies, J.A.Vilán, M. von Schmid, M. Winkel, S. Winkler and F. Wamers, P. Yañez.
CALIFA, a Dedicated Calorimeter for the R³B/FAIR.
Nuclear Data Sheets **120**, pp. 99-101 (2014).
71. F.C.L. Crespi, A. Bracco, R. Nicolini, D. Mengoni, L. Pellegri, E.G. Lanza, S. Leoni, A. Maj, M. Kmiecik, R. Avigo, G. Benzoni, N. Blasi, C. Boiano, S. Bottoni, S. Brambilla, F. Camera, S. Ceruti, A. Giaz, B. Million, A.I. Morales, V. Vandone, O. Wieland, P. Bednarczyk, M. Ciemala, J. Grebosz, M. Krzysiek, K. Mazurek, M. Zieblinski, D. Bazzacco, M. Bellato, B. Birkenbach, D. Bortolato, E. Calore, B. Cederwall, L. Charles, G. de Angelis, P. Désesquelles, J. Eberth, E. Farnea, A. Gadea, A. Görgen, A. Gottardo, R. Isocrate, J. Jolie, A. Jungclaus, N. Karkour, W. Korten, R. Menegazzo, C. Michelagnoli, P. Molini, D.R. Napoli, A. Pullia, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, E. Sahin, M.D. Salsac, B. Siebeck, S. Siem, J. Simpson, P.-A. Söderström, O. Stezowski, Ch. Theisen, C.A. Ur and J.J. Valiente-Dobón.
Isospin character of low-lying pygmy dipole states in Pb 208 via inelastic scattering of O 17 ions.
Physical Review Letters **113**, p. 012501 (2014).
 72. G.J. Cuello, V. Cristiglio, M.A. González and C. Cabrillo.
Structure factor of liquid n-butanol at room temperature.
Journal of Physics: Conference Series **549** -1, p. 012015 (2014).
 73. N. de Sousa, L.S. Froufe-Pérez, G. Armelles, A. Cebollada, M.U. González, F. García, D. Meneses-Rodríguez and A. García-Martín.
Interaction effects on the magneto-optical response of magnetoplasmonic dimers.
Physical Review B, **89**, 20 (2014).
 74. N. de Sousa, J. J. Sáenz, A. García-Martín, L. S. Froufe-Pérez and M. I. Marqués.
Effect of long-range spatial correlations on the lifetime statistics of an emitter in a two-dimensional disordered lattice.
Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics, **89**, 6 (2014).
 75. P. Doornenbal, S. Takeuchi, N. Aoi, M. Matsushita, A. Obertelli, D. Steppenbeck, H. Wang, L. Audirac, H. Baba, P. Bednarczyk, S. Boissinot, M. Ciemala, A. Corsi, T. Furumoto, T. Isobe, A. Jungclaus, V. Lapoux, J. Lee, K. Matsui, T. Motobayashi, D. Nishimura, S. Ota, E. C. Pollacco, H. Sakurai, C. Santamaria, Y. Shiga, D. Sohler and R. Taniuchi.
Intermediate-energy Coulomb excitation of Sn 104: Moderate E2 strength decrease approaching Sn 100.
Physical Review C - Nuclear Physics **90**, p. 061302 (2014).
 76. A. Di Pietro, A.M. Moro, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L.M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, F. Perez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, V. Scuderi, O. Tengblad, D. Torresi, A. Maira Vidal, D. Voulot, F. Wenander, M. Zadro.
Elastic and break-up of the 1n-halo ¹¹Be nucleus.
INPC 2013 - International Nuclear Physics Conference, Vol. 1.
EPJ Web of Conferences, Volume **66**, p. 03023 (2014).
ISSN 2100-014X
ISBN 978-2-7598-1175-5.
 77. L. Díaz, J.J. Camacho, J.P. Cid, M. Martín and J.M.L. Poyato.
Time evolution of the Infrared Laser Ablation Plasma-Plume of SiO.
Applied Physics A **117**- 1, pp. 125-129 (2014).
 78. A. El Bakkali, T. Lamhasni, S. A. Lyazidi, M. Haddad, F. Rosi, C. Miliani, S. Sanchez-Cortes and M. El Rhaiti.
Assessment of a Multi-Technical Non-Invasive Approach for the Typology of Inks, Dyes and Pigments in Two 19th Century's Ancient Manuscripts of Morocco.
Vibrational Spectroscopy **74**, pp. 47-56 (2014).
 79. A. Ertani, D. Pizzeghello, O. Francioso, P. Sambo, S. Sanchez-Cortes and S. Nardi.
Capsicum Chinensis L. Growth and Nutraceutical Properties Are Enhanced by Biostimulants in a Long-Term Period: Chemical and Metabolomic Approaches.
Frontiers in plant science **5**, pp.375-375 (2014).

80. J. P. Fernández-García, M. Cubero, M. Rodríguez-Gallardo, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, M.J.G. Borge, L. Buchmann, C.A. Diget, H.A. Falou, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J. A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A.M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A.M. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad, and P. Walden.
Study of the break-up channel in $^{11}\text{Li}+^{208}\text{Pb}$ collisions at energies around the Coulomb barrier (Conference Paper).
Journal of Physics: Conference Series, Vol. **515**-1, p. 012004 (2014).
81. A. Garzón, B. Fernández, M.A.G. Álvarez, J. Ceballos, J.M. de la Rosa.
Readout Electronic System for Particle Tracking in Secondary Electron Detectors.
Circuits and Systems (MWSCAS), 2014 IEEE 57th International Midwest Symposium on MWSCAS Proc. **2014** p.93-96.
ISSN :1548-3746
Print ISBN: 978-1-4799-4134-6
DOI: 10.1109/MWSCAS.2014.6908360.
82. A. Ghiglini, S. Terrón, K. Thomsen, J. Wolters, M. Magán, F. Martínez, J.P. De Vicente, R. Vivanco, F. Sordo, M. Butzek, J.M. Perlado and F.J. Bermejo.
A neutron production target for ESS based upon the Canned-rods concept.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **756**, pp. 73-81 (2014).
83. A. Gottberg, T.M. Mendonca, R. Luis, J.P. Ramos, C. Seiffert, S. Cimmino, S. Marzari, B. Crepieux, V. Manea, R.N. Wolf, F. Wienholtz, S. Kreim, V.N. Fedosseev, B.A. Marsh, S. Rothe, P. Vaz, J.G. Marques and T. Stora.
Experimental tests of an advanced proton-to-neutron converter at ISOLDE-CERN.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B, **336**, p.146 (2014).
84. G. Grzela, R. Paniagua-Domínguez, T. Barten, D. van Dam, J. A. Sánchez-Gil and J. Gómez Rivas.
Nanowire Antenna absorption probed with Time-Reversed Fourier Microscopy.
Nano Letters, **14**, pp. 3227–3234 (2014).
85. G. Guastalla, D.D. Dijulio, M. Górski, J. Cederkäll, P. Boutachkov, P. Golubev, S. Pietri, H. Grawe, F. Nowacki, A. Algora, F. Ameil, T. Arici, A. Atac, M.A. Bentley, A. Blazhev, D. Bloor, S. Brambilla, N. Braun, F. Camera, C.D. Pardo, A. Estrade, F. Farinon, J. Gerl, N. Goel, J. Grbosz, T. Habermann, T.^{cm}, Hoischen, R.^b, Jansson, K.^b, Jolie, J.^j, Jungclaus, A.ⁿ, Kojouharov, I.^c, Knoebel, R.^c, Kumar, J. Kurcewicz, N. Kurz, N. Lalović, E. Merchan, K. Moschner, F. Naqvi, B.S.N. Singh, J. Nyberg, C. Nociforo, A. Obertelli, M. Pfützner, N. Pietralla, Z. Podolyák, A. Prochazka, D. Ralet, P. Reiter, D. Rudolph, H. Schaffner, F. Schirru, L. Scruton, T. Swaleh, J. Taprogge, R. Wadsworth, N. Warr, H. Weick, A. Wendt, O. Wieland, J.S. Winfield, H.J. Wollersheim.
Analysis and results of the ^{104}Sn Coulomb excitation experiment.
Journal of Physics: Conference Series, Vol. **533**-1, p. 012047 (2014).
86. B. Hernandez, F. Pfluger, E. Lopez-Tobar, S.G. Kruglik, J.V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes, M. Ghomi.
Disulfide linkage Raman markers: a reconsideration attempt.
Journal of Raman Spectroscopy, **45**, pp. 657-664 (2014).
87. J. Hernández-Velasco, C. Cabrillo, M. Castellote and J. Ruiz-Hervias.
6th Meeting of the Spanish Neutron Scattering Association (SETN2012): Preface.
Journal of Physics: Conference Series, **549**, 011001 (2014).
88. A.M. Herrero, P. Carmona, F. Jiménez-Colmenero and C. Ruiz-Capillas.
Polysaccharide gels as oil bulking agents: Technological and structural properties.
Food Hydrocolloids, **36**, p.374 (2014).
89. A.M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, F. Jiménez-Colmenero and P. Carmona.
Raman spectroscopic study of structural changes upon chilling storage of frankfurters containing olive oil bulking agents as fat replacers.
Journal of agricultural and food chemistry, **62**, p.5963 (2014).
90. A. Illana, A. Jungclaus, R. Orlandi, A. Perea, C. Bauer, J.A. Briz, J.L. Egido, R. Gernhäuser, J. Leske, D. Mücher, J. Pakarinen, N. Pietralla, M. Rajabali, T.R. Rodríguez, D. Seiler, C. Stahl, D. Voulot, F. Wenander, A. Blazhev, H. De Witte, P. Reiter, M. Seidlitz, B. Siebeck, M.J. Vermeulen, N. Warr.

- Low-velocity transient-field technique with radioactive ion beams: G factor of the first excited 2^+ state in ^{72}Zn .*
Physical Review C - Nuclear Physics **89**, p. 054316 (2014).
91. A. Illana Sisón, A. Jungclaus, R. Orlandi, A. Perea, J.A. Briz, C. Bauer, R. Gernhäuser, J. Leske, D. Mücher, J. Pakarinen, N. Pietralla, M.M. Rajabali, D. Seiler and C. Stahl.
Magnetic moment measurement in ^{72}Zn using the Transient Field technique and Coulomb excitation in inverse kinematics.
EPJ Web of Conferences, Vol. **66**, p. 02054 (2014).
ISSN: 2100-014X.
ISBN: 978-2-7598-1175-5.
 92. I. Iriepa and J. Bellanato
Synthesis, structural and conformational study of some esters derived from 3-methyl-3-azabicyclo[3.2.1]octan-8(α and β)-ols
Journal of Molecular Structure **1073**, 31-36 (2014)
 93. P.R. John, V. Modamio, J.J. Valiente-Dobón, D. Mengoni, S. Lunardi, T.R. Rodríguez, D. Bazzacco, A. Gadea, C. Wheldon, T. Alexander, G. de Angelis, N. Ashwood, M. Barr, G. Benzoni, B. Birkenbach, P.G. Bizzeti, A.M. Bizzeti-Sona, S. Bottoni, M. Bowry, A. Bracco, F. Browne, M. Bunce, F. Camera, B. Cederwall, L. Corradi, F.C.L. Crespi, P. Désesquelles, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, A. Görgen, A. Gottardo, J. Grebosz, L. Grente, H. Hess, A. Jungclaus, Tz. Kokalova, A. Korichi, W. Korten, A. Kusoglu, S. Lenzi, S. Leoni, J. Ljungvall, G. Maron, W. Meczynski, B. Melon, R. Menegazzo, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, B. Million, P. Molini, G. Montagnoli, D. Montanari, D.R. Napoli, P. Nolan, Ch. Oziol, Zs. Podolyák, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, O.J. Roberts, D. Rosso, E. Sahin, M.-D. Salsac, F. Scarlassara, M. Sferrazza, J. Simpson, P.-A. Söderström, A.M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, Ch. Theisen, C.A. Ur and J. Walshe.
Shape evolution in the neutron-rich osmium isotopes: Prompt g-ray spectroscopy of ^{196}Os .
Physical Review C **90**, p. 021301 (2014).
 94. A. Jungclaus, G.S. Simpson, G. Gey, J. Taprogge, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, T. Sumikama, Z. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, N. Inabe, T. Isobe, H.S. Jung, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, S. Bönig, J.-M. Daugas, F. Drouet, R. Gernhäuser, S. Ilieva, T. Kröll, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, H. Nishibata, R. Orlandi, K. Steiger and A. Wendt.
Isomer and beta decay spectroscopy in the ^{132}Sn region with EURICA (Conference Paper)
EPJ Web of Conferences, Vol. **66**, p. 02040 (2014).
 95. A. Jungclaus, J. Taprogge, G.S. Simpson, G. Gey, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, T. Sumikama, Z. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, N. Inabe, T. Isobe, H.S. Jung, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, S. Bönig, J.-M. Daugas, F. Drouet, R. Gernhäuser, S. Ilieva, T. Kröll, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, H. Nishibata, R. Orlandi, K. Steiger, A. Wendt.
Beta decay and isomer spectroscopy in the ^{132}Sn region: New results from EURICA (Conference Paper)
Journal of Physics: Conference Series, Vol. **533**-1, p. 012045 (2014).
 96. G.T. Koldste, B. Blank, M.J.G. Borge, J.A. Briz, M. Carmona-Gallardo, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, J. Giovinazzo, J.G. Johansen, A. Jokinen, B. Jonson, T. Kurturkian-Nieto, T. Nilsson, A. Perea, V. Pesudo, E. Picado, K. Riisager, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J.-C. Thomas, J. Van de Walle.
Sizeable beta-strength in ^{31}Ar ($\beta 3p$) decay.
Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics **737**, pp. 383-387 (2014).
 97. G.T. Koldste, B. Blank, M.J.G. Borge, J.A. Briz, M. Carmona-Gallardo, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, J. Giovinazzo, B.D. Grann, J.G. Johansen, A. Jokinen, B. Jonson, T. Kurturkian-Nieto, J.H. Kusk, T. Nilsson, A. Perea, V. Pesudo, E. Picado, K. Riisager, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J.-C. Thomas, J. Van De Walle.
Multiparticle emission in the decay of $\text{Ar } 31$.
Physical Review C - Nuclear Physics **89**-6, p. 064315 (2014).
 98. J. Kubackova, I. Izquierdo-Lorenzo, D. Jancura, P. Miskovsky and S. Sanchez-Cortes.

- Adsorption of Linear Aliphatic Alpha, Omega-Dithiols on Plasmonic Metal Nanoparticles: A Structural Study Based on Surface-Enhanced Raman Spectra.*
Physical Chemistry Chemical Physics **16** -23, pp.11461-11470 (2014).
99. D. Larese, M.A. Caprio, F. Pérez-Bernal and F. Iachello.
A study of the bending motion in tetratomic molecules by the algebraic operator expansion method.
Journal of Chemical Physics, **140**, 1 (2014).
100. R. Lic, N. Mrginean, D.G. Ghi, H. Mach, J.L.M. Fraile, G.S. Simpson, A. Aprahamian, C. Bernards, J.A. Briz, B. Bucher, C.J. Chiara, Z. Dlouhý, I. Gheorghe, P. Hoff, J. Jolie, U. Köster, W. Kurcewicz, R. Mrginean, B. Olaizola, V. Pazy, J.M. Régis, M. Rudigier, T. Sava, M. Stnoiu, L. Stroe and W.B. Walters.
Low-lying isomeric states in Ga 80 from the decay of Zn 80.
Physical Review C - Nuclear Physics, **90**, 1 (2014).
101. E. López-Tobar, K. Hara, I. Izquierdo-Lorenzo and S. Sanchez-Cortes.
Plasmonic effects of phenylenediisocyanides linked at interparticle junctions of metal nanoparticles.
Journal of Physical Chemistry C, **119**, p.599 (2014)
102. J. Marganec, F. Wamers, F. Aksouh, Y. Aksyutina, H.A. Pol, T. Aumann, S. Beceiro, C. Bertulani, K. Boretzky, M.J.G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, I. Egorova, H. Emling, O. Ershova, C. Forssén, L.M. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, L. Grigorenko, M. Heil, D.H.H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. Johansson, B. Jonson, M. Karakoç, C. Karagiannis, O. Kiselev, J.V. Kratz, R. Kulesa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, K. Larsson, T.L. Bleis, R. Lemmon, Y.A. Litvinov, K. Mahata, C. Müntz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, Y. Parfenova, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarth, A. Richter, K. Riisager, C.R. Tajés, D. Rossi, G. Schrieder, N. Shulgina, H. Simon, J. Stroth, K. Sümmerer, J. Taylor, O. Tengblad, E. Tengborn, H. Weick, M. Wiescher and C. Wimmer, M. Zhukov.
Study of the $^{15}\text{O}(2p, \gamma)^{17}\text{Ne}$ cross section by coulomb dissociation of ^{17}Ne for the rp process of nucleosynthesis.
Acta Physica Polonica B **45** - 2, pp. 229-234 (2014).
103. G. Marquínez-Durán, A.M. Sánchez-Benítez, I. Martel, L. Acosta, K. Rusek, M.A.G. Álvarez, Berjillos, M.J.G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J.A. Dueñas, J.P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J.L. Flores, J. Gómez-Camacho, N. Keeley, J.A. Labrador, M. Marqués, A.M. Moro, M. Mazzocco, A. Pakou, V.V. Parkar, N. Patronis, V. Pseudo, D. Pierrotsakou, R. Raabe, R. Silvestri, N. Soic, L. Standlyo, I. Strojek, O. Tengblad, R. Wolski, A.H. Ziad.
Near barrier scattering of ^8He on ^{208}Pb .
INPC 2013 - International Nuclear Physics Conference, Vol. 1.
EPJ Web of Conferences, Vol. **66**, p. 03058 (2014).
ISSN 2100-014X
ISBN 978-2-7598-1175-5
104. L. Martínez-Maestro, E. Camarillo, J. A. Sánchez-Gil, R. Rodríguez-Oliveros, J. Ramiro-Bargueño, A. J. Caamaño, F. Jaque, J. García Solé, and D. Jaque.
Gold nanorods for optimized photothermal therapy: The influence of irradiating in the first and second biological window.
RSC Advances, **4**, pp. 54122–54129 (2014).
105. T.M. Mendonca, R. Hodak, V. Ghetta, M. Allibert, D. Heuer, E. Noah, S. Cimmino, M. Delonca, A. Gottberg, M. Kronberger, J.P. Ramos, C. Seiffert and T. Stora.
Production and release of ISOL beams from molten fluoride salt targets.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B, **329**, p.1 (2014).
106. E. Y. Nakanishi, M. Frías, S. Martínez-Ramírez, S. F. Santos, M. S. Rodrigues, O. Rodríguez, and H. Savastano Jr.
Characterization and properties of elephant grass ashes as supplementary cementing material in pozzolan/Ca (OH)₂ pastes.
Construction and Building Materials **73**, pp. 391-398 (2014).
107. Z. Patel, P.A. Söderström, Z. Podolyák, P.H. Regan, P.M. Walker, H. Watanabe, E. Ideguchi, G.S. Simpson, H.L. Liu, S. Nishimura, Q. Wu, F.R. Xu, F. Browne, P. Doornenbal, G. Lorusso, S. Rice, L. Sinclair, T. Sumikama, J. Wu, Z.Y. Xu, N. Aoi, H. Baba, F.L. Bello Garrote, G. Benzoni, R. Daido, Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, S. Go, A. Gottardo, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, K. Kobayashi, M. Kobayashi, T. Komatsubara, I.

- Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, I. Kuti, Z. Li, M. Matsushita, S. Michimasa, C.B. Moon, H. Nishibata, I. Nishizuka, A. Odahara, E. Shin, H. Sakurai, H. Schaffner, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, Z. Vajta and A. Yagi and R. Yokoyama.
Isomer decay spectroscopy of Sm 164 and Gd 166: Midshell collectivity around N=100.
 Physical Review Letters, **113**, 26 (2014).
108. L. Pellegri, A. Bracco, F.C.L. Crespi, S. Leoni, F. Camera, E.G. Lanza, M. Kmiecik, A. Maj, R. Avigo, G. Benzoni, N. Blasi, C. Boiano, S. Bottoni, S. Brambilla, S. Ceruti, A. Giaz, B. Million, A.I. Morales, R. Nicolini, V. Vandone, O. Wieland, D. Bazzacco, P. Bednarczyk, M. Bellato, B. Birkenbach, D. Bortolato, B. Cederwall, L. Charles, M. Ciemala, G. de Angelis, P. Désesquelle, J. Eberth, E. Farnea, A. Gadea, R. Gernhäuser, A. Görgen, A. Gottardo, J. Grebosz, H. Hess, R. Isocrate, J. Jolie, D. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, M. Krzysiek, E. Litvinova, S. Lunardi, K. Mazurek, D. Mengoni, C. Michelagnoli, R. Menegazzo, P. Molini, D.R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, M.D. Salsac, B. Siebeck, S. Sie, J. Simpson, P.-A. Söderström, O. Stezowski, Ch. Theisen, C. Ur, J.J. Valiente Dobon and M. Zieblinski.
Pygmy dipole resonance in ^{124}Sn populated by inelastic scattering of ^{17}O .
 Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics **738**, pp. 519-523 (2014).
109. V. Pesudo, M.J.G. Borge, A.M. Moro, E. Nacher, L. Acosta, M. Alcorta, M.A.G. Alvarez, G.C. Ball, P.C. Bender, R. Braid, M. Cubero, A. Di Pietro, J.P. Di Pietro, P. Figuera, M. Fisichella, B.R. Fulton, A.B. Garnsworthy, J. Gomez-Camacho, G. Hackman, O.S. Kirsebom, K. Kuhn, R. Krüecken, M. Lattuada, J.A. Lay, G. Marquín-Durán, I. Martel, D. Miller, M. Moukaddam, P.D. O'Malley, A. Perea, M.M. Rajabali, A.M. Sánchez-Benítez, F. Sarazin, V. Scuderi, C.E. Svensson, O. Tengblad, C. Unsworth, Z.M. Wang.
Reaction of the halo nucleus ^{11}Be on heavy targets at energies around the coulomb barrier.
 Acta Physica Polonica B **45** - 2, pp. 375-382 (2014).
110. J.P. Ramos, A. Gottberg, T.M. Mendonça, C. Seiffert, A.M.R. Senos, H.O.U. Fynbo, O. Tengblad, J.A. Briz, M.V. Lund, G.T. Koldste, M. Carmona-Gallardo, V. Pesudo and T.Stora.
Intense $^{31-35}\text{Ar}$ beams produced with a nanostructured CaO target at ISOLDE.
 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **320**, pp. 83-88 (2014).
111. K. Riisager, O. Forstner, M. J. G. Borge, J.A. Briz, M. Carmona-Gallardo, L.M. Fraile, H.O. U. Fynbo, T. Giles, A. Gottberg, A. Heinz, J.G. Johansen, B. Jonson, J. Kurcewicz, M.V. Lund, T. Nilsson, G. Nyman, E. Rapisarda, P. Steier, O. Tengblad, R. Thies and S.R. Winkler.
 $^{11}\text{Be}(\beta, p)$, a quasi-free neutron decay?
 Physics Letters B. **732**, pp. 305 – 308 (2014).
112. I.F. Saez Del Bosque, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela.
FTIR study of the effect of temperature and nanosilica on the nanostructure of C-S-H gel formed by hydrating tricalcium silicate.
 Construction and Building Materials **52**, pp. 314-323 (2014).
113. I. Saez Del Bosque, S. Martínez-Ramírez, M. Martín-Pastor, M.T. Blanco-Varela.
Effect of temperature on C-S-H gel nanostructure in white cement.
 Materials and Structures **47**, pp. 1867-1878 (2014).
114. I.Sanchez Alonso, P. Moreno and M. Careche.
*Low field nuclear magnetic resonance (LF-NMR) relaxometry in hake (*Merluccius merluccius*, L.) muscle after different freezing and storage conditions.*
 Food Chemistry, **153**, p.250 (2014)
115. J. Sánchez Del Río, M.J.G. Borge, E. Nácher, A. Perea, G. Ribeiro, O. Tengblad, M. Mårtensson, T. Nilson and H.T. Johansson.
CEPA: A $\text{LaBr}_3(\text{Ce})/\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ Phoswich array for simultaneous detection of protons and gamma radiation emitted in reactions at relativistic energies .
 International Journal of Modern Physics: Conference Series **27**, p.1460143 (2014).
116. J. Sánchez Del Río, M. Mårtensson, M.J.G. Borge, H.T. Johansson, T. Nilson, E. Nácher, A. Perea, G. Ribeiro and O. Tengblad.
CEPA: A $\text{LaBr}_3(\text{Ce})/\text{LaCl}_3(\text{Ce})$ Phoswich array for simultaneous detection of protons and gamma radiation emitted in reactions at relativistic energies .
 INPC 2013 -International Nuclear Physics Conference, Vol 2.

- EPJ Web of Conferences, Volume **66**, p. 11033 (2014).
ISSN 2100-014X
ISBN 978-2-7598-1176-2.
117. J. Sánchez Valencia, I. Sánchez Alonso, I. Martínez and M. Careche.
Estimation of frozen storage time or temperature by kinetic modeling of the Kramer shear resistance and water holding capacity (WHC) of hake (Merluccius merluccius, L.) muscle.
Journal of Food Engineering, **120**, p.37 (2014).
 118. M. Seidlitz, P. Reiter, R. Altenkirch, B. Bastin, C. Bauer, A. Blazhev, N. Bree, B. Bruyneel, P. A. Butler, J. Cederkall, T. Davinson, H. De Witte, D. D. DiJulio, J. Diriken, L. P. Gaffney, K. Geibel, G. Georgiev, R. Gernhäuser, M. Huyse, N. Kesteloot, T. Kröll, R. Krücken, R. Lutter, J. Pakarinen, F. Radeck, M. Scheck, D. Schneiders, B. Siebeck, C. Sotty, T. Steinbach, J. Taprogge, P. Van Duppen, J. VandeWalle, D. Voulot, N. Warr, F. Wenander, K. Wimmer, P. J. Woods and K. Wrzosek-Lipska.
Coulomb excitation of $^{29,30}\text{Na}$: Mapping the borders of the island of inversion.
Physical Review C **89**, p. 024309 (2014).
 119. P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos, A. Feis.
Concentration-Controlled Formation of Myoglobin/Gold Nanosphere Aggregates.
Journal of Physical Chemistry B, **118**, pp. 5082-5092 (2014).
 120. A. Silva-Santisteban, A. Henao, S. Pothoczki, F.J. Bermejo, J.L. Tamarit, E. Guardia, G.J. Cuello, L.C. Pardo.
Short range order of CCl_4 : RMC and MD methods.
Journal of Physics: Conference Series **549**, p.012014 (2014).
 121. G.S. Simpson, G. Gey, A. Jungclaus, J. Taprogge, S. Nishimura, K. Sieja, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.-A. Söderström, T. Sumikama, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, S. Bönig, J.-M. Daugas, F. Drouet, R. Gernhäuser, S. Ilieva, T. Kröll, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, H. Naïdja, H. Nishibata, F. Nowacki, A. Odahara, R. Orlandi, K. Steiger and A. Wendt.
Yrast 6 + seniority isomers of $^{136,138}\text{Sn}$.
Physical Review Letters **113**, p. 132502 (2014).
 122. F. Sordo, F. Fernandez-Alonso, M.A. Gonzalez, A. Ghigolino, M. Magán, S. Terrón, F. Martínez, J.P. De Vicente, R. Vivanco, F.J. Bermejo and J.M. Perlado.
Baseline design of a low energy neutron source at ESS-Bilbao.
Journal of Physics Conference Series **549**, p. 012001 (2014).
 123. J. Taprogge, A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G. S. Simpson, P.-A. Söderström, T. Sumikama, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhäuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, G. Benzoni, S. Bönig, K. Y. Chae, L. Coraggio, A. Covello, J.-M. Daugas, F. Drouet, A. Gadea, A. Gargano, S. Ilieva, F. G. Kondev, T. Kröll, G. J. Lane, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, and A. Wendt.
 $1p_{3/2}$ proton-hole state in $\text{Sn } 132$ and the shell structure along $N=82$
Physical Review Letters **112** - 13, p. 132501 (2014).
 124. J. Taprogge, A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G. S. Simpson, P.-A. Söderström, T. Sumikama, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhäuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, G. Benzoni, S. Bönig, K. Y. Chae, L. Coraggio, A. Covello, J.-M. Daugas, F. Drouet, A. Gadea, A. Gargano, S. Ilieva, F. G. Kondev, T. Kröll, G. J. Lane, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, and A. Wendt.
 $1p_{3/2}$ proton-hole state in $\text{S } -132$ and the shell structure along $N=82$ (Correction vol. 112,132501, 2014)
Physical Review Letters **113** -4, p. 049902 (2014).
 125. J. Taprogge, A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, Z.Y. Xu, P. Doornenbal, G. Lorusso, E. Nácher, G.S. Simpson, P.-A. Söderström, T. Sumikama, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhäuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H.S. Jung, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon

- I, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, G. Benzoni, S. Bönig, K.Y. Chae, L. Coraggio, A. Covello, J.-M. Daugas, F. Drouet, A. Gadea, A. Gargano, S. Ilieva, F.G. Kondev, T. Kröll, G.J. Lane, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, D. Mücher, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, A. Wendt
Identification of a millisecond isomeric state in Cd81129 via the detection of internal conversion and Compton electrons.
 Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics **738**, pp. 223-227 (2014).
126. J. Taprogge, A. Jungclaus, G. Simpson.
Isomeric states in neutron-rich ^{129}In and the $\pi g_{9/2}^{-1} \otimes \nu h_{11/2}^{-1}$ multiplet.
 Journal of Physics: Conference Series, Vol. **533** -1, p. 012043(2014).
127. O. Tengblad, M.J.G. Borge, M. Cubero, E. Nacher, V. Pesudo, A. Perea, J. Gomez-Camacho, A.M. Moro, J.P. Fernandez-Garcia, M.A.G. Alvarez, M. Rodriguez-Gallardo, J.A. Lay, I. Martel, L. Acosta, A.M. Sanchez-Benitez, G. Marquinez-Duran, P. Walden.
Scattering of light halo nuclei on heavy target at energies around the Coulomb barrier.
 INPC 2013 - International Nuclear Physics Conference, Vol. 1.
 EPJ Web of Conferences, Volume **66**, p. 03086 (2014).
 ISSN 2100-014X
 ISBN 978-2-7598-1175-5.
128. O. Tengblad, C.A. Diget.
Beta-delayed (multi-)particle decay studies.
 Hyperfine Interactions **223**- (1-3), pp. 81-101 (2014).
129. T. Toney Fernández, M. Hernández, B. Sotillo, S.M. Eaton, G. José, R. Osellame, A. Jha, P. Fernández and J. Solís.
Role of ion migrations in ultrafast laser written tellurite glass waveguides.
 Optics Express, **22**, p. 15298 (2014).
130. N. Verellen, F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, D. Vercruysse, D. Denkova, L. Lagae, P. Van Dorpe, V. V. Moshchalkov, and J. A. Sánchez-Gil.
Mode Parity-Controlled Fano- and Lorentz-like Line Shapes Arising in Plasmonic Nanorods.
 Nano Letters, **14**, pp. 2322–2329 (2014).
131. R. Vigil De La Villa, M. Frías, R. García, S. Martínez-Ramirez, L. Fernández-Carrasco.
Chemical and mineral transformations that occur in mine waste and washery rejects during pre-utilization calcination.
 International Journal of Coal Geology **132**, pp. 123-130 (2014)..
132. R. Vivanco, A. Ghiglini, J.P. De Vicente, F. Sordo, S. Terrón, M. Magán, J.M. Perlado, F.J. Bermejo.
Basic concept for an accelerator-driven subcritical system to be used as a long-pulse neutron source for Condensed Matter research.
 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **767**, pp. 176-187. (2014).
133. F. Wamers, J. Marganec, F. Aksouh, Yu. Aksyutina, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, S. Beceiro-Novo, C.A. Bertulani, K. Boretzky, M.J.G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, I.A. Egorova, H. Emling, O. Ershova, C. Forssén, L.M. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, L. V. Grigorenko, M. Heil, D.H.H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, M. Karakoç, O.A. Kiselev, J.V. Kratz, R. Kulesa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, K. Larsson, T. Le Bleis, R. Lemmon, Yu.A. Litvinov, K. Mahata, C. Müntz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, Yu.L. Parfenova, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarth, A. Richter, C. Rodriguez-Tajes, D. Rossi, K. Riisager, D. Savran, G. Schrieder, N.B. Shul'Gina, H. Simon, J. Stroth, K. Sümmerer, J. Taylor, O. Tengblad, E. Tengborn, H. Weick, C. Wimmer, M.V. Zhukov.
Exclusive measurements of nuclear breakup reactions of ^{17}Ne .
 INPC 2013 - International Nuclear Physics Conference. Vol. 1
 EPJ Web of Conferences, Volume **66**, p. 03094 (2014).
 ISSN 2100-014X
 ISBN 978-2-7598-1175-5.

134. F. Wamers, J. Marganec, F. Aksouh, Y. Aksyutina, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, S. Beceiro-Novo, K. Boretzky, M.J.G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L.V. Chulkov, D. Cortina-Gil, H. Emling, O. Ershova, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, M. Heil, D.H.H. Hoffmann, H.T. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, O.A. Kiselev, J.V. Kratz, R. Kulesa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, R. Lemmon, Y.A. Litvinov, K. Mahata, C. Müntz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarh, A. Richter, C. Rodriguez-Tajes, D. Rossi, K. Riisager, D. Savran, G. Schrieder, H. Simon, J. Stroth, K. Sümmerer, O. Tengblad, H. Weick, C. Wimmer, M.V. Zhukov.
First observation of the unbound nucleus Ne 15.
Physical Review Letters **112** - 13, p. 132502 (2014).
135. H. Watanabe, G. Lorusso, S. Nishimura, T. Otsuka, K. Ogawa, Z. Y. Xu, T. Sumikama, P.-A. Söderström, P. Doornenbal, Z. Li, F. Browne, G. Gey, H. S. Jung, J. Taprogge, Zs. Vajta, J. Wu, A. Yagi, H. Baba, G. Benzoni, K. Y. Chae, F. C. L. Crespi, N. Fukuda, R. Gernhäuser, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y. K. Kim, I. Kojouharov, F. G. Kondev, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, G. J. Lane, C.-B. Moon, A. Montaner-Pizá, K. Moschner, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, D. Nishimura, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyák, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, A. Wendt, and K. Yoshinaga.
Monopole-driven shell evolution below the doubly magic nucleus Sn 132 explored with the long-lived isomer in Pd 126.
Physical Review Letters **113**, p. 042502 (2014).
136. A. Wendt, J. Taprogge, P. Reiter, P. Golubev, H. Grawe, S. Pietri, P. Boutachkov, A. Algora, F. Ameil, M. A. Bentley, A. Blazhev, D. Bloor, N. S. Bondili, M. Bowry, A. Bracco, N. Braun, F. Camera, J. Cederkall, F. Crespi, A. de la Salle, D. DiJulio, P. Doornenbal, K. Geibel, J. Gellanki, J. Gerl, J. Grebosz, G. Guastalla, T. Habermann, M. Hackstein, R. Hoischen, A. Jungclaus, E. Merchan, B. Million, A. Morales, K. Moschner, Zs. Podolyak, N. Pietralla, D. Ralet, M. Reese, D. Rudolph, L. Scruton, B. Siebeck, N. Warr, O. Wieland, and H. J. Wollersheim.
Isospin symmetry in the sd shell: Transition strengths in the neutron-deficient sd shell nucleus Ar 33.
Physical Review C - Nuclear Physics **90**, p. 054301(2014).
137. Z.Y. Xu, S. Nishimura, G. Lorusso, F. Browne, P. Doornenbal, G. Gey, H.-S. Jung, Z. Li, M. Niikura, P.-A. Söderström, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, H. Baba, S. Franchoo, T. Isobe, P. R. John, I. Kojouharov, S. Kubono, N. Kurz, I. Matea, K. Matsui, D. Mengoni, P. Morfouace, D. R. Napoli, F. Naqvi, H. Nishibata, A. Odahara, E. Şahin, H. Sakurai, H. Schaffner, I. G. Stefan, D. Suzuki, R. Taniuchi, and V. Werner.
 β -Decay Half-Lives of $^{76,77}\text{Co}$, $^{79,80}\text{Ni}$ and ^{81}Cu : Experimental Indication of a Doubly Magic ^{78}Ni .
Physical Review Letters **113**, p. 032505 (2014).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MOLECULAR/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

138. E. del Puerto, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
Adsorption Study and Detection of the High Performance Organic Pigments Quinacridone and 2,9-Dimethylquinacridone on Ag Nanoparticles By Surface-Enhanced Optical Spectroscopy.
Langmuir, **30**, pp.753-761 (2014).
139. Z. Jurasekova, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
Effect of pH on the chemical modification of quercetin and structurally related flavonoids characterized by optical (UV-visible and Raman) spectroscopy.
Physical Chemistry Chemical Physics, **16**, pp.12802-12811 (2014).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MACROMOLECULAR/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

140. A. Gallardo, J.M. Guil, E. Lomba, N.G. Almarza, S.J. Khatib, C. Cabrillo, A. Sanz and J. Pires.
Adsorption of probe molecules in pillared interlayered clays: Experiment and computer simulation.
Journal of Chemical Physics **140** -22, p. 224701 (2014).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

141. F. J. Aoiz, J. Aldegunde, V. J. Herrero and V. Sáez Rábanos.
Comparative dynamics of the two channels of the reaction of D + MuH
Physical Chemistry Chemical Physics, 16, p.9808-9818 (2014).
142. J. Carrasco, G. Vilé, D. Fernández-Torre, R. Pérez, J. Pérez-Ramírez and M.V. Ganduglia-Pirovano.
Molecular-level understanding of CeO₂ as a catalyst for partial alkyne hydrogenation
Journal of Physical Chemistry C, 118, p.5352 (2014)
143. M. Cueto, J. Cernicharo, M.J. Barlow, B. Swinyard, V.J. Herrero, I. Tanarro and J.L. Doménech.
New accurate measurement of ³⁶ArH⁺ and ³⁸ArH⁺ ro-vibrational transitions by high resolution ir absorption spectroscopy.
Astrophysical Journal Letters, **783**, L5 (2014).
144. M. Cueto, M. Piedrahita, C. Caro, B. Martínez-Haya, M. Sanz, M. Oujja and M. Castillejo.
Platinum nanoparticles as photoactive substrates for mass spectrometry and spectroscopy sensors
Journal of Physical Chemistry C, **118**, p. 11432 (2014).
145. R. Escribano, V. Timón, O. Gálvez, B. Maté, M.A. Moreno and V.J. Herrero.
On the infrared activation of the breathing mode of methane in ice.
Physical Chemistry Chemical Physics, **16**, p.16694 (2014).
146. D. Fernández-Torre, J. Carrasco, M. V. Ganduglia-Pirovano and R. Pérez.
Hydrogen activation, diffusion and clustering on CeO₂(111): a DFT+U study
Journal of Chemical Physics, 141, p.01793 (2014).
147. B. M. Giuliano, R. M. Escribano, R. Martín-Doménech, E. Dartois and G. M. Muñoz-Caro.
Interstellar ice analogs: band strengths of H₂O, CO₂, CH₃OH and NH₃ in the far-infrared region.
Astronomy & Astrophysics, **565**, p.A108 (2014).
148. M. Jiménez-Redondo, M. Cueto, J. L. Doménech, I. Tanarro and V. J. Herrero.
Ion kinetics in Ar/H₂ cold plasmas: the relevance of ArH⁺.
RSC Advances **4**, p.62030 (2014).
149. M. Kühnel, J. M. Fernández, F. Tramonto, G. Tejeda, E. Moreno, A. Kalinin, M. Nava, D. E. Galli, S. Montero and R. E. Grisenti.
Observation of crystallization slowdown in supercooled parahydrogen and orthodeuterium quantum liquid mixtures.
Physical Review B **89**, 180201(R) (2014).
150. R. Lemus, M. Sánchez-Castellanos, F. Pérez-Bernal, J. M. Fernández and M. Carvajal.
Simulation of the Raman spectra of CO₂: Bridging the gap between algebraic models and experimental spectra.
Journal of Chemical Physics 141, 054306 (2014).
151. B. Maté, I. Tanarro, M. A. Moreno, M. Jiménez-Redondo, R. Escribano and V. J. Herrero.
Stability of carbonaceous dust analogues and glycine under UV irradiation and electron bombardment,
Faraday Discussions, **168**, p.267 (2014).
152. A. Miguel, R. Morea, M. A. Arriandiaga, M. Hernandez, F. J. Ferrer, C. Domingo, J. M. Fernandez-Navarro, J. Gonzalo, J. Fernandez and R. Balda.
Structural, optical, and spectroscopic properties of Er³⁺-doped TeO₂-ZnO-ZnF₂ glass-ceramics.
Journal of the European Ceramic Society, **34**, p.3959 (2014).
153. F. Mine Balci, N. Uras-Aytemiz, R. Escribano and P.C. Gómez.
Hydration of HNO₃-HOCl clusters: Bonding properties.
Computational and Theoretical Chemistry, **1038**, p.71 (2014).

154. S. Montero and J. Pérez-Ríos.
Rotational relaxation in molecular hydrogen and deuterium: Theory versus acoustic experiments.
Journal of Chemical Physics 141, 114301 (2014).
155. A. Rodríguez, D. Rodríguez, A. Moraleda, I. Bravo, E. Moreno and A. Notario.
Atmospheric chemistry of HFE-7300 and HFE-7500: Temperature dependent kinetics, atmospheric lifetimes, infrared spectra and global warming potentials.
Atmospheric Environment 96, 145-153 (2014).
156. Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, V.J. Herrero, R. Escribano and O. Gálvez.
The formation of carbamate ions in interstellar ice analogues.
Physical Chemistry Chemical Physics, **16**, p.3371 (2014).
157. G. Santoro, S. Yu, M. Schwartzkopf, P. Zhang, S. Koyiloth Vayalil, J. F. H. Risch, M. A. Rübhausen, M. Hernández, C. Domingo, S. V. Roth.
Silver substrates for surface enhanced Raman scattering: Correlation between nanostructure and Raman scattering enhancement.
Applied Physics Letters, **104**, 24 (2014).
158. F. Thibault, R. Z. Martínez, D. Bermejo, S. V. Ivanov, O. G. Buzykind and Q. Ma.
An experimental and theoretical study of nitrogen-broadened acetylene lines.
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiation Transfer, **142**, 17 (2014).
159. H. Tran and J.L. Doménech.
Spectral shapes of Ar-broadened HCl lines in the fundamental band by classical molecular dynamics simulations and comparison with experiment.
Journal of Chemical Physics 141, p.064313 (2014).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés.
Effect of pH on the chemical modification of quercetin and structurally related flavonoids characterized by optical (UV-visible and Raman) spectroscopy.
Physical Chemistry Chemical Physics 16(25), 12802-12811 (2014).
- E. del Puerto, C. Domingo, J.V. García-Ramos and S. Sánchez-Cortés.
Adsorption Study and Detection of the High Performance Organic Pigments Quinacridone and 2,9-Dimethylquinacridone on Ag Nanoparticles By Surface-Enhanced Optical Spectroscopy.
Langmuir **30(3)**, 753-761 (2014).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

160. V.L. Cruz, J. Ramos, S. Martínez and J. Martínez-Salazar.
3D-QSAR as a Tool for Understanding and Improving Single-Site Polymerization Catalysts. A Review.
Organometallics **33(12)**, p.2944 (2014)
161. C. Domingo and M.C. García-Gutiérrez.
Diameter Selection of Carbon Nanotubes in Polymer/SWCNT Nanowire Arrays Fabricated by Template Wetting.
Chemical Physical Chemistry **15(18)**, p.4001 (2014).
162. T.A. Ezquerra, J.C. Canalda, A. Sanz and A. Linares.
On the electrical conductivity of PVDF composites with different carbon-based nanoadditives.
Colloid Polymer Science **292(8)**, p.1989 (2014).
163. J.F. Franco-Gonzalez, V.L. Cruz, J. Ramos and J. Martinez-Salazar.
Protein-Protein and Protein-Membrane Interactions Regarding the Erbb2/Trastuzumab-Fab Complexes. A Coarse-Grained Molecular Dynamics Description.
Biophysics Journal **106(2)**, Supplement 1, p.666A (2014).

164. J.F. Franco-González, V.L. Cruz, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Exploring the dynamics and interaction of a full ErbB2 receptor and Trastuzumab-Fab antibody in a lipid bilayer model using Martini coarse-grained force field.
Journal Computer-Aided Molecular Design **28**(11), p.1093 (2014).
165. R. Hernández, A. Nogales, M. Sprung, C. Mijangos and T.A. Ezquerra.
Slow dynamics of nanocomposite polymer aerogels as revealed by X-ray photocorrelation spectroscopy (XPCS).
Journal of Chemical Physics **140**(2), p.024909 (2014).
166. K. Jerónimo, V.L. Cruz, J. Ramos, J.F. Vega, M. Trujillo, A.J. Muller and J. Martínez-Salazar.
Computer simulations of the early stages of crystal nucleation of linear and short chain branched polyethylene on carbon nanotubes.
European Polymer Journal **56**, p.194 (2014).
167. A. Linares, J.C. Canalda, A. Sanz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec and T.A. Ezquerra.
Broadband Dielectric Spectroscopy of Nanocomposites Based on PVDF and Expanded Graphite.
IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering **64**, p. 012003 (2014).
168. M.A. Malmierca, A. González-Jiménez, I. Mora-Barrantes, P. Posadas, A. Rodríguez, L. Ibarra, A. Nogales, K. Saalwächter and J.L. Valentín.
Characterization of Network Structure and Chain Dynamics of Elastomeric Ionomers by Means of ¹H Low-Field NMR.
Macromolecules **47**(16) p.5655 (2014).
169. J. Martín, M. Campoy-Quiles, A. Nogales, A. Garriga, M. Alonso, A.R. Goñi and M. Martín-González.
Poly(3-hexylthiophene) Nanowires in Porous Alumina: Internal structure under Confinement.
Soft Matter **10**, p.3335 (2014).
170. I. Martín-Fabiani, S. Riede, D.R. Rueda, J. Siegel, J. Boneberg, T.A. Ezquerra and A. Nogales.
Micro- and Submicrostructuring Thin Polymer Films with Two and Three-Beam Single Pulse Laser Interference Lithography.
Langmuir **30**(29), p.8973 (2014).
171. D. Martínez-Tong, J. Cui, M. Soccio, C. García, T.A. Ezquerra and A. Nogales.
Does the glass transition of polymers changes upon 3D confinement?.
Macromolecular Chemistry and Physics **215**(17), p.1620 (2014).
172. D.E. Martínez-Tong, A.S. Najar, M. Soccio, A. Nogales, N. Bitinis, M.A. López-Manchado and T.A. Ezquerra.
Quantitative Mapping of Mechanical Properties in Polylactic Acid/Natural Rubber/Organoclay Bionanocomposites as Revealed by Nanoindentation with Atomic Force Microscopy.
Composites Science and Technology **104**(19). p.34 (2014).
173. D. Martinez-Tong, B. Vanroy, M. Wubbenhorst, A. Nogales and A. Napolitano.
Crystallization of poly(L-lactide) confined in ultrathin films: competition between finite size effects and irreversible chain adsorption.
Macromolecules **47** (7), p.2354 (2014).
174. R. Matesanz, C. Trigilia, J. Rodríguez-Salarichs, I. Zanardic, B. Pera, A. Nogales, W.S. Fange, J. Jiménez-Barbero, A. Canales, I. Barasoain, I. Ojimaç and J.F. Díaz.
Taxanes with high potency inducing tubulin assembly overcome tumoural cell resistances?.
Bioorganic and Medicinal Chemistry **22**(18), p.5078 (2014).
175. J. Qiyu, C.O. Sorzano, J.M. de la Rosa-Trevín, J.R. Bilbao-Castro, R. Núñez-Ramírez, O. Llorca, F. Tama and S. Jonic.
Iterative Elastic 3D-to-2D Alignment Method Using Normal Modes for Studying Structural Dynamics of Large Macromolecular Complexes.
Structure **22**(3), p.496 (2014).
176. E. Rebollar, S. Pérez, M. Hernández, C. Domingo, M. Martín, T.A. Ezquerra, J.P. Garcia-Ruiz and M. Castillejo.

- Physicochemical modifications accompanying UV laser induced surface structures on poly(ethylene terephthalate) and their effect on adhesion of mesenchymal cells.*
Physical Chemistry Chemical Physics **16**(33), p.17551 (2014).
177. A. Romo-Uribe, J.A. Arcos-Casarrubias, A. Flores, C. Valerio-Cárdenas and A. E. González.
Influence of rubber on the curing kinetics of DGEBA epoxy and the effect on the morphology and hardness of the composites.
Polymer Bulletin **71**(5), p.1241 (2014).
178. S. Sanmartín, J. Ramos, J.F. Vega and J. Martínez-Salazar.
Strong influence of branching on the early stage of nucleation and crystal formation of fast cooled ultralong n-alkanes as revealed by computer simulation.
European Polymer Journal **50**, p.190 (2014).
179. A. Sanz, A. Nogales, I. Puente-Orench, M.C. García-Gutiérrez, J. Campo, W. Haussler, M. Soccio, N. Lotti, A. Munari and Ezquerra T.A.
Confined dynamics in poly(ethylene terephthalate): a coherent and incoherent neutron scattering study.
Journal of Physics: Conference Series **459**(1), p.012011 (2014).
180. A. Sanz, A. Nogales, I. Puente-Orench, M. Jiménez-Ruiz and T.A. Ezquerra.
Changes in mobility of plastic crystal ethanol during its transformation into the monoclinic crystal state.
Journal of Chemical Physics **140**(5), p.054510 (2014).
181. M. Soccio, N. Alayo, I. Martin-Fabiani, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, E. Rebollar, D.E. Martinez-Tong, F. Pérez-Murano and T.A. Ezquerra.
On the Assessment by Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering of Replica Quality in Polymer Gratings Fabricated by Nanoimprint Lithography.
Journal of Applied Crystallography **47**(2), p.613 (2014).
182. M. Soccio, G. Luongo, C. Esteves, A. Salvador-Matar, O. Ahumada, D.R. Rueda, M.C. García-Gutiérrez, N. Lotti, A. Munari and T.A. Ezquerra.
Thermomechanical response of a semicrystalline polymer in the vicinity of the melting by using microcantilever technology.
Applied Physics Letters **104**(25), p.251904 (2014).
183. M. Soccio, A. Nogales, I. Martin-Fabiani, N. Lotti, A. Munari and T.A. Ezquerra.
Relaxation Dynamics and Cold Crystallization of Poly(pentamethylene terephthalate) as Revealed by Dielectric Spectroscopy.
Polymer **55**(6), p.1552 (2014).
184. H. Vargas-Villagrán, A. Romo-Uribe, E. Terán-Salgado, M. Domínguez-Díaz and A. Flores.
Electrospun polylactic acid non-woven mats incorporating silver nanoparticles.
Polymer Bulletin **71**(9), p.2437 (2014).
185. J.F. Vega, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Effect of short chain branching in molecular dimensions and Newtonian viscosity of ethylene/1-hexene copolymers: matching atomistic simulations to conformational and rheological experimental properties.
Rheologica Acta **53**(1), p.1 (2014).
186. J.F. Vega, Y. da Silva., E. Vicente-Alique, R. Núñez-Ramírez, M. Trujillo, A.J. Müller and J. Martínez-Salazar.
Influence of chain branching and molecular weight on melt rheology and crystallization of polyethylene/carbon nanotube nanocomposites.
Macromolecules **47**(16), p.5668 (2014).
187. F. Zouai, S. Bouhelal, M. E. Cagiao, F. Z. Benabid, D. Benachour and F. J. Baltá Calleja.
Study of Nanoclay Blends Based on Poly (Ethylene Terephthalate)/ Poly(Ethylene Naphthlene 2,6-Dicarboxylate) prepared by Reactive Extrusion.
Journal of Polymer Engineering **34**, p.431 (2014).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- A. Gallardo, J.M. Guil, E. Lomba, N.G. Almarza, S.J. Khatib, C. Cabrillo, A. Sanz and J. Pires.
Adsorption of probe molecules in pillared interlayered clays: experiment and computer simulation.
Journal of Chemical Physics **140**, p.224701 (2014).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. Laura Castelló Gomar, Jerónimo Cortez, Daniel Martín-de Blas, Guillermo A. Mena Marugán, and José M. Velhinho.
Unitary Evolution and Uniqueness of the Fock Quantization in Flat Cosmologies with Compact Spatial Sections.
Electronic Journal of Theoretical Physics **11**, 43 (2014).
2. M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, A.N. Antonov and E. Moya de Guerra.
Structure properties of neutron-rich exotic nuclei.
East European Journal of Physics **1**, 4 (2014).

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

3. Bustinduy, F.J. Bermejo.
A Conceptual Description of the ESS-Bilbao Accelerator.
Physics Procedia **60**, 157-166 (2014).
4. M.J. García Borge.
Nuclear Physics for Medicine
Nuclear Physics News, **24**, p.3 (2014)
5. Jan Paepen, Magnus Gårdestig, Per Reppenhausen Grim, John Keightley, Jonas Nilsson, Kari Peräjärvi, Olof Tengblad and Harri Toivonen.
Critical parameters and performance tests for the evaluation of digital data acquisition hardware.
European Commission- Joint Research Centre- Institute for Reference Materials and Measurements.
Report EUR **26976**, p.1-32 , TG Report: December 2014.
ISBN 978-92-79-44517-0 (pdf)
ISSN 1831-9424 (online); doi:10.2788/66637
6. Kari Peräjärvi, John Keightley, Jan Paepen, Olof Tengblad and Harri Toivonen.
List-mode data acquisition based on digital electronics. State- of- the- art report.
European Commission- Joint Research Centre- Institute for the Protection and Security of the Citizen.
Report EUR **26715**, p.1-41, TG Report: June 2014.
ISBN 978-92-79-38985-6; doi:10.2788/88299
7. H. Toivonen, P. Reppenhausen, O. Tengblad, J. Keightley, J. Paepen, K. Abbas, F. Schneider, J. Nilsson and K. Peräjärvi.
Remote expert support of field teams.
European Commission- Joint Research Centre- Institute for the Protection and Security of the Citizen.
Report EUR **27099**, p.1-32, TG Report: December 2014.
ISSN 1831-9424 (online); doi:10.2788/20613

8. P.-A. Söderström, S. Nishimura, H. Baba, F. Browne, R. Daido, P. Doornenbal, Y. Fang, G. Gey, T. Isobe, H.-S. Jung, Z. Li, G. Lorusso, D. Lubos, K. Mochner, Z. Patel, S. Rice, H. Sakurai, L. Sinclair, T. Sumikama, J. Taprogge, Z. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, Z. Xu, A. Yagi, R. Yokoyama, K. Yoshinaga, G. Benzoni, A. Blazhev, P. Boutachkov, A. Bruce, R. Gernhäuser, E. Ideguchi, A. Jungclaus, G. D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, N. Kurz, Y. K. Kwon, M. Lewitowicz, Z. Liu, R. Lozeva, C.-B. Moon, M. Niikura, A. Odahara, Z. Podolyák, P. Regan, O. Roberts, G. Simpson, H. Schaffner, C. Townsley, and R. Wadsworth.
Status of the EURICA project after one year at RIKEN.
Proceedings of the “12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12)”.
JPS Conf. Proc. Vol. 2, **013046** (2014).
9. F. Sordo, F. Fernandez-Alonso, S. Terrón, M. Magán, A. Ghiglini, F. Martinez, F.J. Bermejo, J.M. Perlado.
Baseline Design of a Low Energy Neutron Source at ESS-Bilbao.
Physics Procedia **60**, 125-137 (2014).

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

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

1. Carlos Barceló, Luis C. Barbado, Luis J. Garay and Gil Jannes.
Avoiding the Trans-Planckian Problem in Black Hole Physics.
Progress in Mathematical Relativity, Gravitation and Cosmology. Proceedings of the Spanish Relativity Meeting ERE 2012.
Springer Proceedings in Mathematics & Statistics **60**, 129 (2014).
2. Mikel Fernández-Méndez, Guillermo A. Mena Marugán and Javier Olmedo.
Complete Quantization of Scalar Cosmological Perturbations.
Progress in Mathematical Relativity, Gravitation and Cosmology. Proceedings of the Spanish Relativity Meeting ERE 2012.
Springer Proceedings in Mathematics & Statistics **60**, 261 (2014).
3. Daniel Martín-de Blas, Mercedes Martín-Benito and Guillermo A. Mena Marugán.
Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology: Hybrid Quantization and Approximated solutions.
Progress in Mathematical Relativity, Gravitation and Cosmology. Proceedings of the Spanish Relativity Meeting ERE 2012.
Springer Proceedings in Mathematics & Statistics **60**, 327 (2014).

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

4. R. Aroca, M. Campos Vallette, J.V. García Ramos, S. Sánchez Cortés, J.A. Sánchez Gil and P. Sevilla.
Amplificación plasmónica de espectros Raman y de fluorescencia: SERS y SEF sobre nanoestructuras metálicas.
Editorial CSIC. Madrid. (2014). 174 págs.
ISBN: 978-84-00-09820-9.
5. C. Domingo, L. Guerrini, Z. Jurasekova, S. Sanchez-Cortes and J.V. Garcia-Ramos.
Superficies metálicas nanoestructuradas y su funcionalización para sensores moleculares basados en espectroscopia vibracional (Raman e infrarrojo) intensificada por superficies.
“Nuevos usos para viejos materiales y nuevos materiales para viejos usos”.
Editorial Complutense. Ciclos Complutenses. Madrid (2014). págs. 19-36.
ISBN: 978-84-616-9801-1.

6. José V. García Ramos.
“Qué sabemos de... Las Moléculas: cuando la luz te ayuda a vibrar”.
 Editorial CSIC y Los Libros de la Catarata. Madrid (2014), 117 págs.
 ISBN: 978-84-00-09792-9.
7. A. Garzón, B. Fernández, M.A.G. Álvarez, J. Ceballos and J.M. de la Rosa.
Spatial Detection System for Mini-Secondary Electrons Detectors.
 DCIS Ref. Proc. XX1-XX5 (2014).

6.3.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

8. Mari Cruz García-Gutiérrez, Aurora Nogales and Tiberio Ezquerra.
Introducción a la física de los materiales poliméricos.
“Nuevos usos para viejos materiales y nuevos materiales para viejos usos”.
 Editorial Complutense. Ciclos Complutenses. Madrid (2014), Chapter 5, págs.93-117
 ISBN: 978-84-616-9801-1.
9. M. Castillejo, T. Ezquerra, M. Oujja, E. Rebollar
Laser Nanofabrication of Soft Matter
 Lasers in Materials Science
 Editorial Complutense. Madrid (2014), Chapter 13, págs. 325-344
 ISBN 978-3-319-02898-9

6.4 TESIS DOCTORALES / PH.D. THESES

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

Title: Hierarchical mean field theory for frustrated spin and boson systems.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 22nd of September 2014.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Daniel Huerga Gómez.

Supervisor: Jorge Dukelsky.

Title: Perturbaciones y Dinámica Efectiva en Cosmología Cuántica de Lazos inhomogénea.

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

Date: 2nd of December 2014.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Mikel Fernández Méndez.

Supervisor: Guillermo A. Mena Marugán.

Title: Percepción de las Radiaciones Hawking y Unruh por Distintos Observadores: Aplicaciones de la Función de Temperatura Efectiva.

University: Facultad de Ciencias, Universidad de Granada.

Date: 4th of April 2014.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Luis Cortés Barbado.

Supervisor: Carlos Barceló Serón and Luis J. Garay Elizondo.

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

Title: Estudios Experimentales de la Reacción Nuclear con Interés Astrofísico $^3\text{He}(\alpha,\gamma)^7\text{Be}$.

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

Date: 4th of July 2014.

Mark: Sobresaliente "Cum laude".

Candidate: Mariano Carmona Gallardo.

Supervisor: Olof Tengblad and B.S. Nara Singh.

Title: Sistema Electrónico de Lectura para el Trazado Espacial de Haces de Partículas de Futuros Aceleradores.

University: Universidad de Sevilla.

Date: 4th of December 2014.

Mark: Sobresaliente "Cum laude".

Candidate: Alejandro Garzón Camacho.

Supervisor: Marcos A. G. Álvarez (CNA/CSIC, Universidad de Sevilla), Joaquín Gómez Camacho (CNA/CSIC, Universidad de Sevilla) y José M. de la Rosa Utrera (IMS-CNM/CSIC, Universidad de Sevilla).

Title: Medida de Momentos Magnéticos mediante campos transitorios con haces radiactivos en REX-ISOLDE.

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

Date: 18th of June 2014.

Mark: Sobresaliente "Cum laude".

Candidate: Andrés Illana Sisón.

Supervisor: Andrea Jungclaus.

Title: Application of Plasmonic Nanodevices Based on the Creation of Interparticle Hot Spots for Detection of Pollutants.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 22nd of October 2014.

Mark: Sobresaliente "Cum laude".

Candidate: Jana Kubacková.

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés and Daniel Jancura.

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Confinamiento en Nanoestructuras Poliméricas: Preparación, propiedades, aplicaciones e implicaciones físicas.

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

Date: 10th of October 2014.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: Daniel Enrique Martínez Tong.

Supervisor: Aurora Nogales Ruiz y Alejandro Sanz Parras.

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

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

Title: Estudio sistemático de las distribuciones de intensidad Gamow-Teller en emisores doble beta

Type: Master thesis

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

Date: September 2014.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Diana Navas Nicolás.

Supervisor: Pedro Sarriguren and Elvira Moya.

Title: Can Quantum Information Survive a Cosmological Cataclysm?

Type: Master thesis

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

Date: 22nd of September 2014.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Ana Blasco.

Supervisor: Luis J. Garay Elizondo, M. Martín-Benito and E. Martín-Martínez.

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

Title: Development of Enhanced Vibrational Spectroscopic Techniques for the Analysis of Artistic Samples.

Type: Master thesis.

University: Università degli studi di Bologna (Italia).

Date: March 2014.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Chiara Dieru.

Supervisors: Silvia Prati and Santiago Sánchez Cortés.

Title: Surface-Enhanced Raman Spectroscopy of Therapeutical Peptides.

Type: Master thesis.

University: Universidad Autónoma de Madrid.

Date: September 2014.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Niall Prendiville.

Supervisor: Santiago Sánchez Cortés.

Title: Optical properties of metal-semiconductor nanostructures: Zero-index metamaterials.

Type: Master thesis.

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Date: June 2014.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Diego Romero Abujetas.

Supervisor: José A. Sánchez Gil.

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 2009	2009	Expected 2010	2010	Expected 2011	2011	Expected 2012	2012	Expected 2013	2013	Expected 2014	2014
Number of ISI publications	165	166	152	174	163	186	173	182	182	179	180	187
Number of non-ISI publications	14	29	-	28	-	18	-	12	-	13	-	18
Total stock of PhD fellowships and contracts	26	34	-	25	-	23	-	18	-	22	-	22
Stock of postdoc fellowships and contracts	18	18	-	22	-	23	-	18	-	18	-	7
Number of PhD Theses defended	7	11	7	8	7	5	8	8	10	5	6	8
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	30	43,6	33,8	41,4	34,8	63,5	35,4	57,4*	36	82,4*	12	32,9*

*Includes data of BSc courses.

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR - 2013)
Astronomy and Astrophysics	1	13.312
Nano Letters	2	12.940
Physical Review Letters	12	7.728
Structure	1	6.794
Astrophysical Journal	1	6.280
Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics	5	6.019
Macromolecules	3	5.927
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	2	5.877
Astrophysical Journal Letters	1	5.602
European Physical Journal C	1	5.436
Physical Review D - Particles, Fields, Gravitation and Cosmology	9	4.864
Journal of Physical Chemistry C	4	4.835
Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids	2	4.384
Food Hydrocolloids	1	4.280
Organometallics	1	4.253
Physical Chemistry Chemical Physics	6	4.198
Faraday Discussions	1	4.194
Soft Matter	1	4.151
Journal of Applied Crystallography	1	3.950
Physical Review C - Nuclear Physics	14	3.881
Biophysical Journal	1	3.832
Polymer	1	3.766
RSC Advances	2	3.708
New Journal of Physics	2	3.671
Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics	7	3.664
Frontiers in Plant Science	1	3.637

Composites Science and Technology	1	3.633
Optics Express	1	3.525
Applied Physics Letters	2	3.515
Journal of Physical Chemistry B	1	3.377
Chemphyschem	1	3.360
Nuclear Data Sheets	2	3.353
International Journal of Coal Geology	1	3.313
Food Chemistry	1	3.259
European Polymer Journal	2	3.242
Food and Bioprocess Technology	1	3.126
Journal of Chemical Physics	11	3.122
Journal of agricultural and food chemistry	1	3.107
Classical and Quantum Gravity	3	3.103
Atmospheric Environment	1	3.062
Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics	1	2.991
Bioorganic and Medicinal Chemistry	1	2.951
Journal of Computer-Aided Molecular Design	1	2.782
Journal of Food Engineering	1	2.576
Journal of Raman Spectroscopy	2	2.519
Macromolecular Chemistry and Physics	1	2.451
European Physical Journal A	1	2.421
Colloid and Polymer Science	1	2.410
Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	1	2.326
Journal of the European Ceramic Society	1	2.307
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer	1	2.288
Construction and Building Materials	2	2.265
Journal of physics-Condensed matter	1	2.223
Chemical Physics Letters	1	1.991
Rheologica Acta	1	1.781
General Relativity and Gravitation	1	1.725
Applied Physics A	1	1.694
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	1	1.687
Applied Physics B: Lasers and Optics	1	1.634
Journal of Molecular Structure	1	1.599
Vibrational Spectroscopy	1	1.547
Few-Body Systems	2	1.508
Polymer Bulletin	2	1.491
International Journal of Modern Physics D	1	1.420
Materials and Structures/Materiaux et Constructions	1	1.390
Computational and Theoretical Chemistry	1	1.368
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	3	1.316
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B	3	1.186
International Journal of Modern Physics A	1	1.086
Acta Physica Polonica, Series B	2	998
Journal of Combinatorial Theory - Series A	1	868
Physics of Atomic Nuclei	1	595
Journal of Polymer Engineering	1	500
TOTAL:	154	Average Impact Factor: 3,94

Number of Journals: 73

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

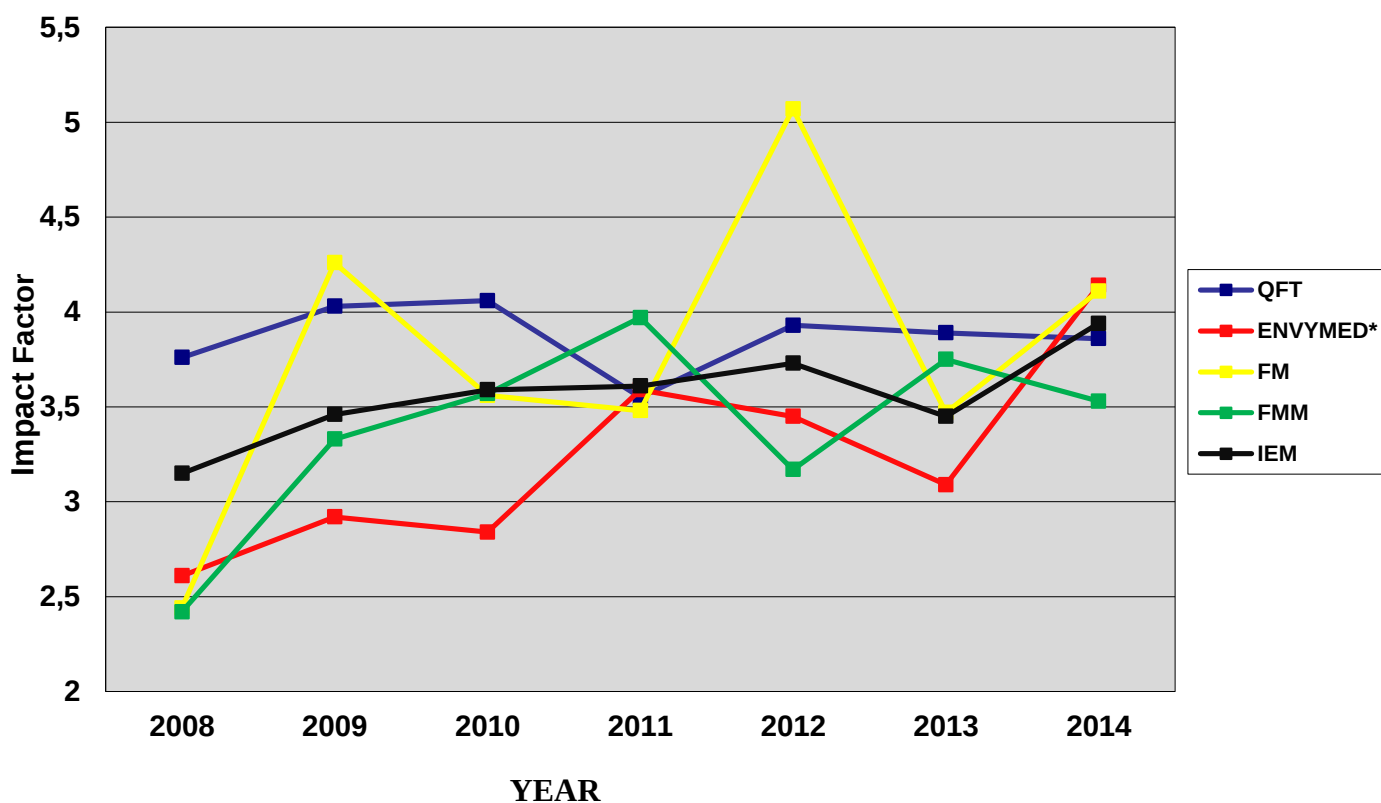
Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry: ____ **QFT**

Molecular Physics: ____ **FM**

Macromolecular Physics: ____ **FMM**

Nuclear, Vibrational and
Disordered Media Spectroscopy ____ **ENVYMED**



* El Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos de los años 2008 a 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componían: el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos/

The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the years 2008-2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		"Ramón & 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	7	1	1	-	1	-	2	2	3	-	-	-	14	3	17
ENVYMED	9	3	-	-	-	-	-	2	9	2	2	1	20	8	28
FM	10	3	1	-	-	1	1	-	1	1	2	-	15	5	20
FMM	6	5	1	-	1	1	1	1	5	1	2	1	16	9	25
ADMON.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1	9	1	9	10
IEM	32	12	3	-	2	2	4	5	18	4	7	11	66	34	100

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: 91

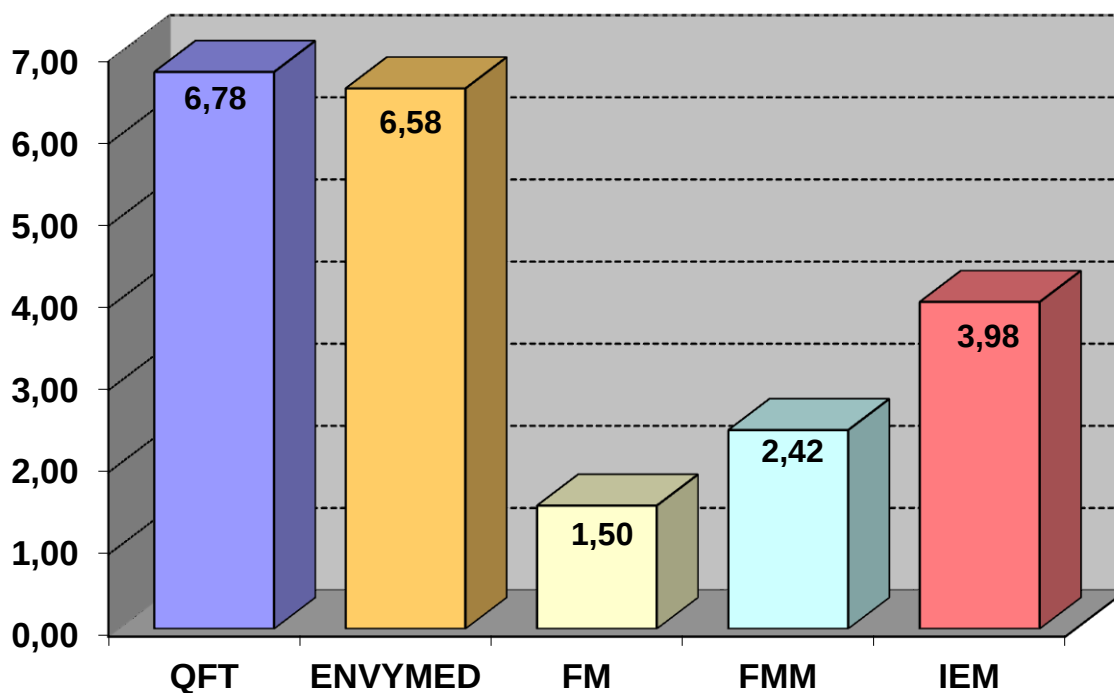
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	61	76(+3) ¹	19(+2) ¹	28(+1) ¹	187
Other publications	5	11		2	18

¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

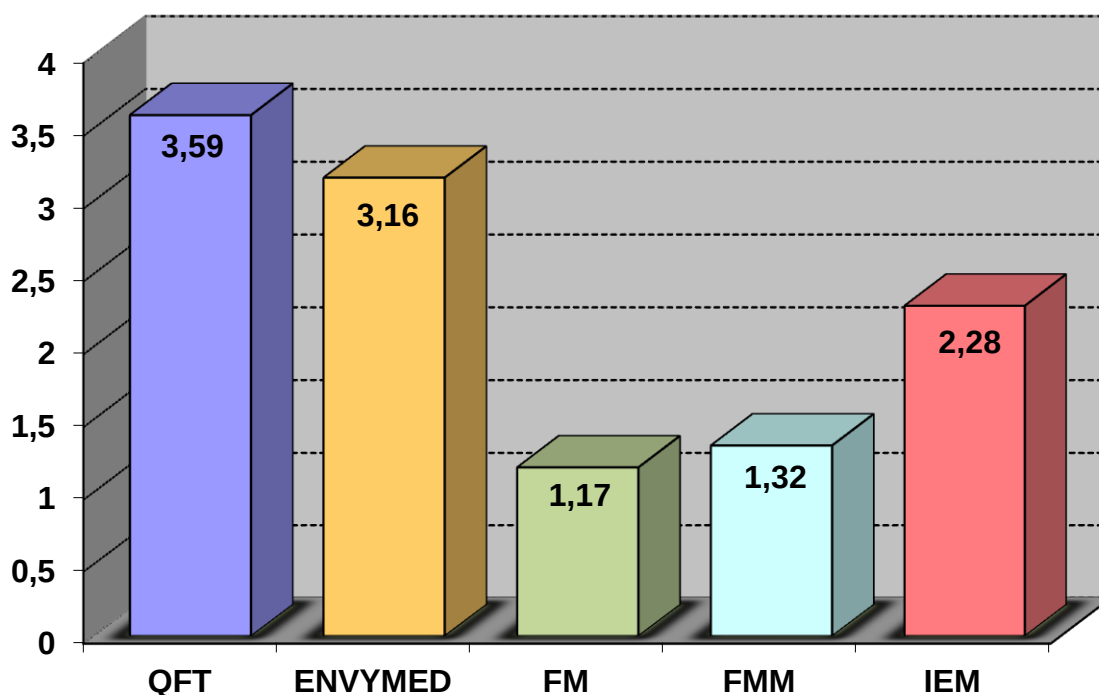
7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS

- **Ratio por investigador senior** (plantilla más “Ramón y Cajal”) / *Ratio by senior researcher* (staff plus “Ramón y Cajal”).



Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior /
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher: 4,25

- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) / *Ratio by scientific staff* (excluding support staff).



(See “Department Key” in section 7.3)

ÍNDICE

INDEX

Introducción / Introduction..... 2**1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute4**

Dirección / Direction5

Junta de Instituto / Institute Board.....5

Claustro Científico / Scientific Staff.....5

Departamentos de Investigación / Research Departments.....6

Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry6

Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy7

Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics7

Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics8

Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office9

Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC9

2A. Labor Investigadora 11

2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....12

2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....20

2A.3 Dpto. de Física Molecular.....30

2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....35

2B. Research Activities..... 43

2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.44

2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Dept.....51

2B.3 Molecular Physics Dept.60

2B.4 Macromolecular Physics Dept.65

3. Proyectos de Investigación / Research Grants 73

3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry74

3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy75

3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics77

3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics79

4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation 81

4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....82

4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry82

4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational

and Disordered Media Spectroscopy	84
4.1.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	89
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	90
4.2 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	93
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	93
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	93
4.2.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	94
4.2.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	94
4.3 Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences	94
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	94
4.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	97
4.3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	97
4.3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	97
4.4 Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	97
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	97
4.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	98
4.4.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	99
4.4.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	99
 5 Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	 100
5.1 Docencia / Teaching	101
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	101
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	101
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	102
5.2 Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	103
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	103
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	104
5.2.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	104
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	105
5.3 Premios y Otros Méritos / Awards	106
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	106
5.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	106
5.3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	107
5.3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	107
5.4 Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	108

5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	108
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	110
5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	111
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	112
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	112
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	112
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities ...	112
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	112
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	113
5.6.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	113
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	113
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	115
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	116
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	116
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	120
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	130
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	131
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	134
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	134
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	134
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	135
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	135
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	135
6.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	136
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	136
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	136
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	137
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	137
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	137
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	137

6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	138
-------	---	-----

7 Tablas y Datos / *Tables and Data* 139

7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	140
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals ...	140
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	142
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments	143
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	143
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments	144