

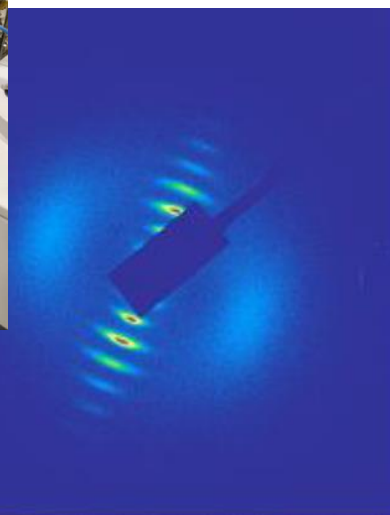
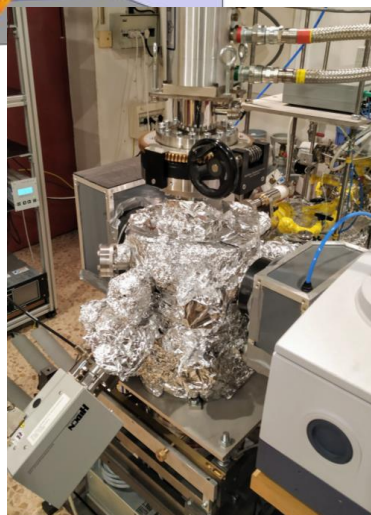
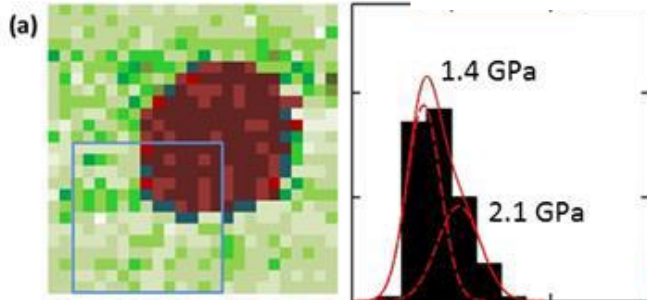
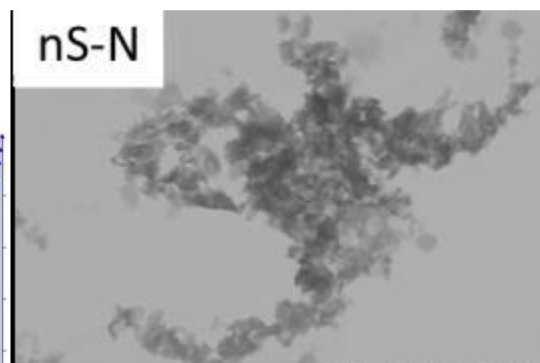
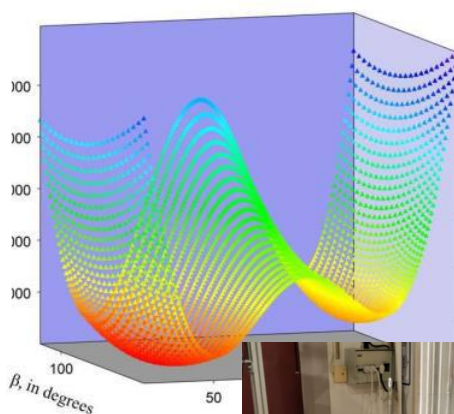
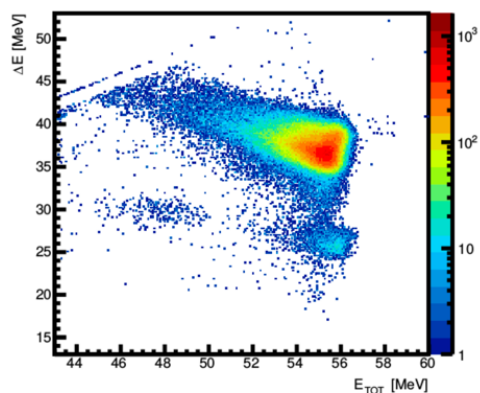
Instituto de Estructura de la Materia

Memoria 2018

Consejo Superior de Investigaciones

ANNUAL REPORT 2018

Telescope A-AA $25.5^\circ < \theta < 29.7^\circ$



MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

MEMORIA 2018

SCIENTIFIC REPORT 2018

**Instituto de Estructura de la Materia
Consejo Superior de Investigaciones Científicas
C/ Serrano, 113bis,119, 121, 123
28006 Madrid
Tef.: 91 561 68 00 Fax: 96 564 55 57
Web: www.iem.csic.es**

INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) es un Instituto de Investigación sólidamente asentado en el CSIC y de gran visibilidad en España, en Europa y en la comunidad internacional. Con una reputación de excelencia, este Instituto intenta también ser atractivo para estudiantes, investigadores y visitantes.

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2018, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Astrofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física, Ciencia de los Materiales y Biofísica.

En sus comienzos en 1976 el instituto contaba con cinco científicos en plantilla. En la actualidad, acoge a unos cuarenta y dos investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

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

Desde 1994, el IEM pertenece al Centro de Física Miguel Antonio Catalán (CFMAC). Los Servicios de 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 para contribuir de forma decisiva a resolver los principales retos que la sociedad afronta.

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2018 en 146 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

The Institute of Structure of Matter (IEM) aims to be a Research Institute deeply entrenched in the CSIC and highly visible in Spain, in Europe and in the international community. With a reputation for excellence, this Institute seeks to also be attractive to students, researchers and visitors.

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2018, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Astrophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry, Materials Science and Biophysics.

In its beginnings in 1976 the institute had five scientists on staff. Currently, IEM hosts around forty-two permanent researchers distributed in the following Departments:

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

Since 1994, the IEM is part of the Physics Centre “Miguel Antonio Catalán” (CFMAC). The 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 to boldly contribute to solve the main challenges that society faces.

This scientific activity, during 2018, has crystallized in 146 ISI publications.

CAPÍTULO 1

ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1

INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / *DIRECTION***Director / *Director*:** Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán**Vicedirector 1º / *Assistant Director 1st*:** Prof. Tiberio Ezquerro Sanz**Vicedirector 2º / *Assistant Director 2nd*:** Dr. José M. Fernández Sánchez**Gerente / *Manager*:** D^a. Marta M^a Granja Perdices**JUNTA DE INSTITUTO / *INSTITUTE BOARD*****Presidente / *President*:** Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán**Secretaria / *Secretary*:** D^a. Marta M^a Granja Perdices**Vocales / *Members*:**

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof^a. M^a José García Borge

Prof. José González Carmona

Dra. M^a Belén Maté Naya

Dr. Rafael Molina Fernández

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / *SCIENTIFIC STAFF***Presidente / *President*:** Dr. Guillermo A. Mena Marugán**Secretario / *Secretary*:** Dr. Vicente Timón Salinero (hasta**Secretario / *Secretary*:** Dr. Vincenzo Giannini (desde 19 de diciembre) (*since 19th of December*)**Personal Investigador / *Scientific staff*:**

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

Dra. María José Capitán Aranda

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Prof^a. María José García Borge

Dra. María Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. Vincenzo Giannini

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. Enrique Nácher González

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

Dra. M^a Luisa Senent Diez

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Prof. Olof E. I. Tengblad

Dr. Vicente Timón Salinero

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Personal Científico / *Research Staff:*

Dr. Pedro Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Pedro Sarriguren Suquibide

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. María Luisa Senent Diez

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Gianluca Calcagni

Científico Titular (desde 10 de julio) / *Tenured Scientist (since July 10th)*

Dr. Luis Javier Garay Elizondo

Doctor Vinculado / *Adjoint Researcher*

D. Álvaro Rubio García

Contrato Predoctoral FPI / *Predocctoral Contract FPI*

D. Alejandro García-Quismondo Martín

Beca JAE Intro (desde 1 de septiembre) / *JAE Intro Fellowship (since September 1st)*

D. Enrique Benito Matías

Autorización de Estancia (hasta 1 de septiembre) / *Authorized Stay (until September 1st)*

Dr. Bogar Díaz Jiménez

Autorización Estancia Postdoctoral (desde 1 de octubre) / *Postdoctoral Authorized Stay (since October 1th)*

Dra. Beatriz Elizaga de Navascués

Autorización de Estancia (hasta 2 de febrero) / *Authorized Stay (until February 2th)*

D^a. Victoria G. Gámez García

Autorización de Estancia (desde 1 de noviembre) / *Authorized Stay (since November 1st)*

D. Juan Margalef Bentabol

Autorización de Estancia (hasta 20 de noviembre) / *Authorized Stay (until November 20th)*

D^a Maika Martínez Guareño

Autorización de Estancia (hasta 20 de abril) / *Authorized Stay (until April 20th)*

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Estancia (hasta 20 de octubre) / *Authorized Stay (until October 20th)*

D. Santiago Prado Loy

Autorización de Estancia (hasta 19 de septiembre) / *Authorized Stay (until September 19th)*

D. Jacinto Velasco Rebolledo

Autorización de Estancia / *Authorized Stay*

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Profª. Mª José García Borge

Profesora de Investigación (desde el 30 de octubre)
 / *Research Professor (since October 30th)*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación (jubilado el 28 de diciembre) / *Research Professor (retired on December 28th)*

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Mª Vega Cañamares Arribas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vincenzo Giannini

Científico Titular (desde 27 de marzo) / *Tenured Scientist (since March 27th)*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Enrique Nácher González

Científico Titular (hasta 26 de junio) / *Tenured Scientist (until June 26th)*

Dr. Víctor Vaquero Soto

Contrato Postdoctoral POP (desde 17 de noviembre) / *Postdoc Contract POP (until november 17th)*

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

D. Álvaro Fernández Martínez

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

D. Miguel García Castaño

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (hasta 30 septiembre) / *University Graduate Youth Guarantee Program (until September 30th)*
 Contrato Predoctoral FPI (hasta 3 de febrero) - / *Predocctoral Contract FPI*

Dra. Irene Marroquín Alonso

Contrato Predoctoral FPI (hasta 3 de febrero) – Titulado Superior Contratado -ENSAR (desde 1 de abril) / *Predocctoral Contract FPI (until February 3rd) - University Graduate Contract (since Abril 1st)*

Dr. Moisés Martín Garrido

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (hasta 30 septiembre) / *University Graduate Youth Guarantee Program (until September 30th)*

D. Javier Díaz Ovejas

Contrato Predoctoral FPI / *Predocctoral Contract FPI*

D. Diego Romero Abujetas

Contrato Predoctoral FPU / *Predocctoral Contract FPU*

Dª Silvia Viñals Onses

Contrato Predoctoral / *Predocctoral Contract*

Dª Alba Espina García

Estancia Temporal (desde 10 septiembre) / *Authorized Stay (since september 10th)*

Dr. Rafael J. Gonçalves Rubira

Estancia Temporal (desde 10 septiembre) / *Authorized Stay (since september 10th)*

D^a Giulia Vannucci

Estancia Temporal ERASMUS (desde 7 de mayo hasta 30 noviembre) / *Authorized Stay ERASMUS (since may 7th until november 30th)*

D^a Zohreh Chahardoli

Estancia Temporal ERASMUS (desde 21 noviembre) / *Authorized Stay ERASMUS (since november 21st)*

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS / *Specialist Technician OPIS*

D^a. Purificación Corchete Corchete

Ayudante Investigación de OPIS/ *Research Assistant OPIS*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. M^a Belén Maté

Científica Titular / *Tenured Scientist*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Rafael Escribano Torres

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. Salvador Montero Martín

Profesor de Investigación “Ad Honorem” /
Research Professor “Ad Honorem”

Dr. José Luis Domenech Martínez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. José María Fernández Sánchez

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. Isabel Tanarro Onrubia

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Guzmán Tejeda Gala

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Vicente Timón Salinero

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Miguel Jiménez Redondo

Titulado Superior Contratado (desde 16 de
noviembre) / *University Graduate (until November
16th)*

D. Ramón J. Peláez de Fuentes

Titulado Superior Contratado (hasta 31 de agosto) /
University Graduate (until August 31st)

D. Germán Molpeceres de Diego

Contrato Predoctoral FPI / *Predocctoral Contract
FPI*

Dr. Francisco Colmenero Ruiz

Autorización de Estancia (hasta 2 de octubre) /
Authorized Stay (until October 2th)

Dr. Óscar Gálvez González

Autorización de Estancia (hasta 7 de abril) /
Authorized Stay (until April 7th)

D. LI Zi Hao

Autorización de Estancia (HKUST) (desde 1 junio
hasta 31 agosto) / *Authorized Stay (HKUST) (since
June 1st until August 31st)*

Personal de apoyo / Support Staff:

D^a. M^a Victoria Hoyos Alfonso

Técnico Superior Contratado Programa Garantía
Juvenil de la C.M. / *Technician Contract Youth
Guarantee Program of C.M.*

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Ayudante de Investigación OPI / *Research
Assistant OPIs*

D. Ángel González Valdenebro

Técnico Especializado de OO.PP. de Investigación
/ *Research Assistan OPIs*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / Tenured Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / Research Professor

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. María José Capitán Aranda

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. María Cruz García Gutiérrez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científico Titular / Tenured Scientist

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación "Ad Honorem" (desde el 10 de julio / Research Professor "Ad Honorem" (since July 10th))

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado RyC / Tenure Track Contract R&C.

D. Edgar Gutiérrez Fernández

Titulado Superior Contratado (desde 16 de mayo) / University Graduate (since May 16th)

D^a Anna Espasa Valdepeñas

Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (hasta 15 de enero) / University Graduate Youth Guarantee Program (until January 15th)

D^a. Patricia Enrique Jiménez

Contrato Predoctoral FPI / Predoctoral Contract FPI

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Técnico Superior Especializado de OPIS / Specialized University Graduate OPIs

D. Guillermo Juárez Segura

Técnico Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (hasta 15 de enero) / Technician Contract Youth Guarantee Program (until January 15th)

Virginia Souza-Egipsy Sánchez

Técnico Superior Especializado de OPIS / Specialized University Graduate OPIs

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA FINANCES AND ADMINISTRATION

D ^a . Marta M ^a Granja Perdices	Gerente en funciones / <i>Manager</i>
D ^a . Rosario Carrasco Nicolás	Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D ^a . Alicia Fernández Clavero	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Ana María García Arribas	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Carmen García Collado	Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D ^a . Isabel Lombán Botello	Auxiliar OO.AA. / <i>Auxiliary OO.AA.</i>

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

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

BIBLIOTECA / LIBRARY

D ^a . Flora Granizo Barrena	Técnico Biblioteca y Documentación / <i>Library and Doc. Specialist</i>
D. José Antonio Rodríguez Valcárcel	Ayudante de Biblioteca y Documentación (hasta 10 de enero) / (<i>until January 10th</i>)

CONSERJERÍA / RECEPTION

D ^a . Soledad Moreno Zambrano	Ayudante Gestión y Servicios Comunes / <i>Common Services Assistant</i>
D ^a . Cristina Peco Marco	Ayudante Gestión y Servicios Comunes (desde 1 de febrero) / <i>Common Services Assistant (since February 1st)</i>

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

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

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Fernando Pueyo García	Técnico Especialista Grado Medio de OPIS / <i>Technical Specialist OPIs</i>
D. José Ramón Paredes Rodríguez	Contrato INEM (hasta 28 de mayo) / <i>INEM Contract (until May 28th)</i>
D. Francisco Tello Garrido	Contrato INEM (hasta 28 de mayo) / <i>INEM Contract (until May 28th)</i>

TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

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

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

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

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Gravitación y Cosmología
- Teoría de la Materia Condensada
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica, a la Atmósfera y al estudio de Nuevos Materiales.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Cosmología Cuántica de Lazos.
- Teoría Cuántica de Campos en Espaciotiempos Curvos.
- Gravedad no-local.
- Espaciotiempos multiescala.
- Ondas gravitacionales (Consortio LISA).
- Teorías de campos y geometría.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Modelos integrables cuánticos.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Interacciones de Van der Waals en ZIFs.
- Fotodisociación de radicales orgánicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Formalismo hamiltoniano geométrico.
- Teoría cuántica de campos en espacios curvos.
- Combinatoria.
- Métodos computacionales.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hipersféricos.
- Algoritmos de programación semidefinida.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA

GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

En los últimos años, la Cosmología Cuántica de Lazos (CCL) se ha aplicado para extender el análisis de las perturbaciones primordiales a la era de Planck y discutir los posibles efectos de la geometría cuántica en el fondo cósmico de microondas. Dos enfoques para CCL con un comportamiento ultravioleta admisible que conducen a predicciones que son compatibles con las observaciones son el formalismo híbrido, propuesto por nuestro Grupo en el IEM, y el de métrica vestida, propuesto por Ashtekar y sus colaboradores. A pesar de sus similitudes y relaciones, en 2018 hemos demostrado que las ecuaciones efectivas que estos dos formalismos proporcionan para la evolución de las perturbaciones primordiales tensoriales y escalares resultan ser algo diferentes. Cuando se ignora la *backreaction*, la discrepancia aparece solo en el término de masa dependiente del tiempo de las ecuaciones de campo correspondientes. Hemos explicado cómo surge esta diferencia debido a los distintos procedimientos de cuantización seguidos. Además, dado el rol privilegiado que desempeña el rebote (*big bounce*) en CCL, por ejemplo, como un instante de tiempo natural para establecer las condiciones iniciales para las perturbaciones, hemos analizado la positividad de la masa dependiente del tiempo cuando se produce este rebote. Hemos comprobado que la masa de

las perturbaciones tensoriales es positiva en el formalismo híbrido cuando la contribución cinética a la densidad de energía del inflatón domina sobre su potencial, así como para un sector de soluciones de fondo considerablemente grande alrededor de esa situación, mientras que dicha masa resulta ser siempre no positiva en el formalismo de métrica vestida. Resultados similares también son válidos para las perturbaciones escalares.

También hemos analizado el paso a un límite continuo de los modos de Fourier de las perturbaciones primordiales en espaciotiempos cosmológicos en CCL. Hemos demostrado que este límite puede alcanzarse incluso si uno comienza considerando una celda fiducial finita como sección espacial. Hemos centrado nuestra atención en los regímenes en los que la geometría de fondo sigue la denominada dinámica efectiva de CCL, aunque nuestros argumentos pueden extenderse más allá de este régimen y a otros formalismos en Cosmología. Si bien el sistema perturbado puede describirse de manera invariable frente a cambios del volumen fiducial utilizando variables adecuadas, hemos demostrado que el límite continuo deseado puede establecerse, más bien, por medio de transformaciones de escalado del volumen físico cuando este volumen crece sin límites. Estas transformaciones conducen a un modelo con un continuo de modos e independiente de cualquier escala de referencia para el volumen físico.

Además, hemos investigado el papel desempeñado por el vacío de las fluctuaciones primordiales en CCL híbrida. Hemos considerado escenarios en los que el potencial del inflatón es un término de masa y la geometría cuántica no perturbada se rige por la dinámica efectiva de CCL. En esta situación, las soluciones fenomenológicamente interesantes tienen un régimen preinflacionario en el que la energía cinética del inflatón domina sobre el potencial. Para este tipo de soluciones, hemos demostrado que los espectros de potencia primordiales dependen en gran medida de la elección del vacío. Hemos estudiado en detalle el caso de estados adiabáticos de bajo orden, y el vacío no oscilante introducido en nuestro Grupo, todos ellos impuestos en el rebote. Los espectros adiabáticos, generalmente, resultan estar suprimidos a escalas grandes, y muestran oscilaciones rápidas con un aumento de potencia en escalas intermedias. En el vacío no oscilante, por otra parte, hay una supresión de potencia para escalas grandes, pero las oscilaciones rápidas están ausentes. Hemos argumentado que las oscilaciones se deben a la imposición de condiciones adiabáticas iniciales en la región de dominio cinético, y que también estarían presentes en Relatividad General. Además, hemos discutido la sensibilidad de nuestros resultados a cambios del tiempo inicial y de otros datos del modelo.

Finalmente, hemos discutido la libertad disponible en CCL híbrida para definir variables canónicas para el contenido de materia, y hemos investigado si esto se puede usar para derivar una teoría de campo cuántica con buenas propiedades para el sector material. Más específicamente, hemos centrado nuestro estudio en el caso de perturbaciones fermiónicas de tipo Dirac en un espacio-tiempo cosmológico. En particular, hemos analizado la posibilidad de obtener una reacción fermiónica finita, así como un hamiltoniano que esté definido densamente en el espacio de Fock y que, a la vez, dicte la dinámica de Schrödinger asociada con la evolución de las variables de creación y destrucción elegidas para las perturbaciones fermiónicas.

La gravedad cuántica no-local es una teoría de campos renormalizable y unitaria de la gravedad que contiene operadores con infinitas derivadas. Este año ha sido marcado por tres hitos fundamentales, desarrollados por nuestro grupo (uno de los más activos a nivel internacional sobre esta teoría). En primer lugar, hemos resuelto el problema de Cauchy y demostrado que la dinámica requiere solo un número finito de condiciones iniciales en la métrica, así extendiendo por primera vez resultados análogos de 2007 para un campo escalar. En paralelo, hemos podido contar de forma rigurosa el número de grados de libertad no-perturbativos de la teoría, también finitos. Estos resultados permiten dar un sentido físico a las soluciones dinámicas clásicas. En tercer lugar, hemos demostrado que todas las métricas con tensor de Ricci nulo son soluciones estables de la teoría. Eso implica que también Schwarzschild es solución y la teoría admite agujeros negros singulares, contrariamente a la idea general de que la no-localidad es suficiente para resolver las singularidades de la relatividad general. Actualmente se está estudiando si estas soluciones son físicas o no.

Respecto a los espaciotiempos multiescala, generados dentro de gravedades cuánticas, utilizamos nuestros avances notables de 2017 para empezar la fase más fundamental de la teoría, es decir, la construcción de la llamada dinámica con derivadas fraccionarias. Un estudio preliminar sobre las propiedades matemáticas de estos operadores ha evidenciado la necesidad de replantear algunas de las ideas iniciales, que verán su maduración en 2019. En paralelo, hemos puesto las cotas observacionales más fuertes hasta el momento (procedentes de tests de precisión del Modelo Estándar de interacciones electrodébiles) para los modelos ya desarrollados.

Por último, en 2018 uno de los miembros del grupo ha entrado en el Consorcio LISA, en los Grupos de Trabajo de Cosmología y Física Fundamental. LISA es un interferómetro espacial de la ESA/NASA operativo a partir de 2034 que detectará ondas gravitacionales de objetos astrofísicos a redshift grande, como por ejemplo agujeros negros súper masivos y sistemas binarios rápidos. A pesar del hecho de que estamos todavía lejos para aprovechar de los datos de LISA, hay una intensa actividad para completar la llamada Fase A del experimento, donde se finalizarán los detalles del diseño instrumental y la ciencia que podremos hacer con ello. En los Grupos de Trabajos teóricos, estamos explorando la posibilidad de poner cotas observacionales sobre modelos de gravedad modificada y gravedad

cuántica. Los dos proyectos en curso terminarán en los primeros meses de 2019 y no hay publicaciones para 2018. Sin embargo, hay que resaltar el crecimiento de las relaciones a nivel nacional e internacional de nuestro grupo con otros trabajando en el Consorcio o, incluso, en los proyectos multiautor arriba mencionados. Dicha actividad ha sido acompañada por un aumento de experiencia científica en este campo, lo que puede jugar un papel importante en la investigación futura en el IEM.

Como aplicación de los métodos combinatorios desarrollados por los miembros del grupo para problemas relevantes en gravedad cuántica, hemos utilizado una serie de ideas introducidas en el estudio de sistemas cuánticos lineales compuestos para la resolución de algunos problemas en Gravedad Cuántica de Lazos (LQG). En particular, hemos estudiado el comportamiento del espectro de operadores geométricos, como el de área, relevantes en el estudio de los agujeros negros en LQG. Mediante una generalización de las funciones generatrices habituales obtenida utilizando transformadas de Laplace y Mellin, hemos podido determinar el comportamiento asintótico de la densidad de los autovalores del operador de área en el límite de áreas grandes y también una representación muy precisa para esta cantidad en la zona del espectro correspondiente a áreas pequeñas. Por el camino, hemos obtenido identidades, hasta ahora desconocidas, sobre los números de Bernoulli (un interesante resultado colateral de nuestro uso de métodos combinatorios y de teoría de números).

Otro desarrollo interesante, esta vez dentro del ámbito de la teoría cuántica de campos en espaciotiempos curvos, ha sido la introducción de un método eficiente para extender las técnicas de regularización y renormalización adiabáticas al tratamiento de los campos de Dirac en cosmología cuántica. La idea crucial a este respecto fue encontrar una manera de escribir la ecuación de evolución para las funciones del tiempo que describen los modos de Fourier del campo de Dirac como una ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un Hamiltoniano matricial de dimensión dos por dos. A partir de esto, logramos encontrar un esquema de resolución perturbativo compatible con la aproximación adiabática. La solución fue construida mediante un procedimiento iterativo que nos permitió escribirla como un producto de operadores unitarios. Las propiedades de simetría de la solución así obtenida han facilitado la comprensión de algunas características de los resultados conocidos sobre este problema. Específicamente, hemos podido utilizar este nuevo enfoque para recuperar los resultados conocidos sobre anomalías conformes y de traza en varios modelos de interés cosmológico (con acoplos de tipo Yukawa y campos electromagnéticos).

Hemos propuesto y estudiado en detalle una propuesta de un método para medir directamente la función de dos puntos en campos cuánticos. Con el objetivo de adquirir una comprensión más profunda de los campos gravitatorios intensos, hemos llevado a cabo un análisis de la inestabilidad debida a la presencia de ergorregiones en sistemas cuánticos rotantes, llegando a la conclusión de que existen regiones de metaestabilidad en el espacio de parámetros. También hemos diseñado un método para tener en cuenta las no localidades (posiblemente originadas por efectos cuánticos en teorías efectivas) en la teoría de campos mediante la introducción de un grado de libertad adicional relacionado con la escala del sistema. Nos hemos enfrentado al problema de la constante cosmológica desde el punto de vista de la teoría de campos relativistas aplicada a la gravedad argumentando que, quizá, no es un problema en absoluto.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Teoría variacional de la matriz densidad reducida para sistemas fuertemente correlacionados

El estudio de sistemas fuertemente correlacionados requiere el desarrollo de herramientas teóricas que vayan más allá de los límites de las teorías de campo medio. A lo largo de los años se desarrollaron varios métodos más refinados, cada uno con sus propias limitaciones. Entre ellos, cabe mencionar el grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG) (limitado a baja dimensión e interacciones de corto rango), métodos basados en Monte Carlo cuántico (limitados por el problema de signo), y varios métodos variacionales combinados con proyección de simetrías. Uno de estos métodos variacionales, la matriz densidad reducida variacional (VRDM) parece ser uno de los más promisorios para tratar sistemas fuertemente correlacionados. Recientemente, hemos aplicado con éxito este método a modelos de pairing atractivos, implementando un código de programación semidefinida. De forma inesperada, hemos obtenido resultados exactos para el estado fundamental de estos sistemas incluyendo condiciones de positividad solo en la matriz densidad reducida de 2 partículas. Como una extensión del método, implementamos en el código el conjunto completo de condiciones de positividad sobre la matriz densidad reducida de 3 partículas. Con esta nueva herramienta calculamos el estado fundamental de varias moléculas y de modelos de pairing repulsivo, mostrando importantes mejoras con respecto al marco anterior sin incrementar significativamente el coste computacional.

Termodinámica cuántica

La dinámica fuera del equilibrio de sistemas cuánticos fuertemente correlacionados es uno de los problemas físicos más fascinantes. Todavía existen muchas preguntas abiertas que van desde cómo relajan estos sistemas al equilibrio a cómo se puede extraer trabajo útil. Un problema fundamental es averiguar si un sistema posee cantidades

conservadas (o cargas), ya que estas pueden influir en su dinámica de maneras muy drásticas. Hemos propuesto un protocolo general para revelar la existencia de estas cargas basado en un conjunto de relaciones exactas entre las fluctuaciones fuera del equilibrio y las propiedades en equilibrio de un sistema cuántico. Hemos aplicado estas relaciones de fluctuación generalizadas a un simulador cuántico de iones atrapados, demostrando su relevancia para obtener estimaciones correctas de la temperatura de medidas fuera del equilibrio. Nuestros hallazgos ayudarán a guiar la investigación en la interacción entre fluctuaciones térmicas y cuánticas en simulaciones cuánticas y en el diseño de nuevos dispositivos y máquinas cuánticas.

Estudio del modelo de Haldane con interacciones

Dentro del campo de los sistemas topológicos es de interés fundamental entender cómo se comportan las propiedades topológicas de un sistema cuando se introducen interacciones. Hemos tratado de dar respuesta a esta pregunta estudiando un modelo de interés en el campo, el modelo de Haldane, cuyas propiedades topológicas son bien conocidas. Hemos estudiado este modelo, del cual se han hecho dos copias con espín y se ha añadido una interacción on-site entre espines que podría ser simulada sencillamente en un experimento de átomos ultrafríos. Mediante la introducción de un novedoso campo medio que consigue capturar las correlaciones del sistema y mediante el formalismo de Matrix Product State hemos conseguido caracterizar la topología del sistema en el modelo con interacciones. También hemos realizado una propuesta experimental para el estudio de este sistema en un experimento de átomos ultrafríos. Nuestro trabajo y el novedoso campo medio que hemos introducido permitirá avanzar en la caracterización de las fases topológicas en sistemas topológicos con interacciones al abrir la puerta al estudio de sistemas de tamaño relevante.

Superconductividad en bicapas de grafeno rotadas

Hemos investigado también la fundamentación teórica de la superconductividad observada en bicapas rotadas de grafeno por el grupo de Pablo Jarillo en el MIT. Este ha sido uno de los descubrimientos más importantes de los últimos años en el contexto de la física de la materia condensada, y ha despertado ciertamente mucha atención por ser el primer caso en que un material hecho puramente de carbono muestra ser superconductor, sin ningún tipo de dopado químico. Además, este descubrimiento representa un cambio de paradigma en la búsqueda de materiales con superconductividad no convencional, dado que la complejidad química se ve reemplazada aquí por la complejidad estructural de las bicapas rotadas, que se vuelven superconductoras cerca del así llamado ángulo mágico de rotación, cuando el período de la red de moaré resultante está por encima de los 10 nanómetros.

En el momento presente, el mecanismo responsable de la superconductividad en las bicapas de grafeno rotadas está por determinar, y han surgido dos tipos diferentes de propuestas, fundamentadas o bien en la interacción electrón-fonón o en la interacción electrón-electrón. En este contexto, hemos propuesto una teoría microscópica precisa que centra el origen de la superconductividad en la gran anisotropía desarrollada por la línea de Fermi de las bicapas rotadas para los pequeños ángulos de rotación en los que se vuelven superconductoras. Nuestra construcción teórica se puede considerar una variante del llamado mecanismo de Kohn-Luttinger, que fue concebido como una vía alternativa hacia la superconductividad partiendo de la interacción puramente repulsiva de Coulomb. Generalmente, la inestabilidad de Kohn-Luttinger suele aparecer a escalas de energía extremadamente bajas mientras que, en el caso de las bicapas de grafeno rotadas, se ve amplificada por la duplicación y subsiguiente fuerte acoplo de singularidades de van Hove del espectro electrónico en las proximidades del ángulo mágico, lo que conduce a la aparición de puntos de silla muy extendidos en la banda de valencia más alta. En estas circunstancias, hemos encontrado que el apantallamiento se vuelve fuertemente anisotrópico a lo largo de la línea de Fermi, siendo capaz de inducir un canal de atracción en la interacción electrón-electrón efectiva. Esta es la semilla necesaria para disparar la inestabilidad superconductoras, que tiene lugar en nuestro modelo a una escala de baja energía consistente con las temperaturas críticas observadas en los experimentos. Además, hemos demostrado que la gran densidad de excitaciones electrón-hueco derivada de la línea de Fermi es capaz de desarrollar una inestabilidad en forma de onda de densidad de espín, adyacente a la inestabilidad superconductoras, para niveles de dopado cerca de la singularidad de van Hove del espectro. Este detalle puede explicar también la existencia de la fase aislante observada a medio llenado de la red de moaré, que parece jugar el papel de fase precursora del régimen de superconductividad, y resulta ser el otro ingrediente clave dentro del parecido asombroso que el diagrama de fases de las bicapas rotadas guarda con el de sistemas fuertemente correlacionados tales como los superconductores de alta temperatura.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Propiedades de la desintegración beta en núcleos ricos en neutrones

El estudio de las propiedades de desintegración beta en distintas regiones de masa nuclear es de gran interés desde el punto de vista de la propia estructura nuclear, así como debido a las aplicaciones que pueden tener en Astrofísica Nuclear. Durante el pasado año se estudiaron regiones ricas en neutrones en isótopos de calcio, titanio y cromo, caracterizados por estados fundamentales que pueden presentar cierta deformación. El principal interés del estudio de las propiedades de desintegración nucleares en estos núcleos radica en los cambios estructurales a que da lugar la

evolución isotópica y al papel que estas desintegraciones pueden desempeñar en nuestro entendimiento de los procesos astrofísicos de tipo Urca involucrados en los mecanismos de enfriamiento en enanas blancas y estrellas de neutrones debido a la emisión de neutrinos. El modelo teórico en el que basamos este estudio consiste en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (quasiparticle random phase approximation, QRPA) con campos medios obtenidos auto consistentemente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme 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. Las deformaciones correspondientes al núcleo en equilibrio se obtienen auto consistentemente estudiando las superficies de energía que nos muestran la energía del núcleo para cada posible deformación nuclear.

Nuestro trabajo ha servido para determinar tanto vidas medias de desintegración como probabilidades de emisión de neutrones retardados. Se han calculado también las más detalladas distribuciones energéticas de la intensidad Gamow-Teller que caracterizan la desintegración ocurrida. Los resultados para los isótopos más cercanos al valle de estabilidad se han comparado con las todavía escasas vidas medias experimentales obteniendo un buen acuerdo con ellas. El resto de resultados para núcleos más inestables aparecen como predicciones para ser contrastadas con experimentos que en la actualidad se están llevando a cabo en RIKEN (Japón) y MSU (USA), así como para ser utilizadas en simulaciones astrofísicas.

Núcleos como sistemas de tres cuerpos con interacciones de campo medio

Un aspecto importante de la tarea llevada a cabo durante estos últimos meses ha sido el desarrollo un nuevo método que permite construir la interacción entre clusters de partículas a partir de un cálculo estándar de campo medio. Más concretamente, la idea es tener en cuenta la estructura del core para construir una interacción de campo medio que es la que sienten los nucleones del halo. De este modo se combinan los grados de libertad de pocos y muchos cuerpos, y desarrollamos una herramienta computacional eficiente aplicable a estados ligados y del continuo, y que en principio es aplicable a distintos campos de la física. Formulamos pues un modelo de tres cuerpos autoconsistente para describir un core rodeado por dos nucleones de valencia, en el que el core se trata mediante una aproximación de campo medio con una interacción de Skyrme efectiva. En un primer cálculo, este nuevo método ha sido aplicado al ^{26}O (^{24}O más dos neutrones), siendo capaces de reproducir tanto los datos experimentales existentes como los resultados obtenidos con otros modelos fenomenológicos con más parámetros. Se obtiene también que la desintegración del estado fundamental se corresponde con una desintegración directa en el continuo, sin contribución de desintegración secuencial a través de la resonancia $d_{3/2}$ del ^{25}O , resonancia que se obtiene también del cálculo numérico, y cuya energía reproduce la información experimental correspondiente. Igualmente hemos estudiado los procesos de captura radiactiva de dos protones a través del ^{68}Se , analizando el carácter directo o secuencial de dicha captura. Igualmente, se ha empleado el núcleo ^{70}Ca para investigar como los halos de neutrones y los estados de Efimov surgen de manera natural cuando para un determinado isótopo nos acercamos a la línea de goteo de neutrones.

Estados de Efimov

Es bien sabido que las características de los estados de Efimov varían dependiendo de las masas de sus constituyentes y de los confinados que estos estén en el espacio. En particular, estos estados no aparecen en dos dimensiones, mientras que en tres dimensiones la presencia de dos constituyentes muy masivos frente al tercero es especialmente favorable, ya que los estados de Efimov están mucho más próximos.

En este contexto hemos estudiado de manera sistemática el comportamiento de los estados de Efimov en sistemas de tres bosones con masas diferentes y en dimensiones no enteras. Igualmente, para el caso más favorable de dos constituyentes masivos y uno ligero, hemos mostrado como los estados de Efimov se ponen de manifiesto mediante un escalado discreto de las secciones eficaces en colisiones átomo-dímero.

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

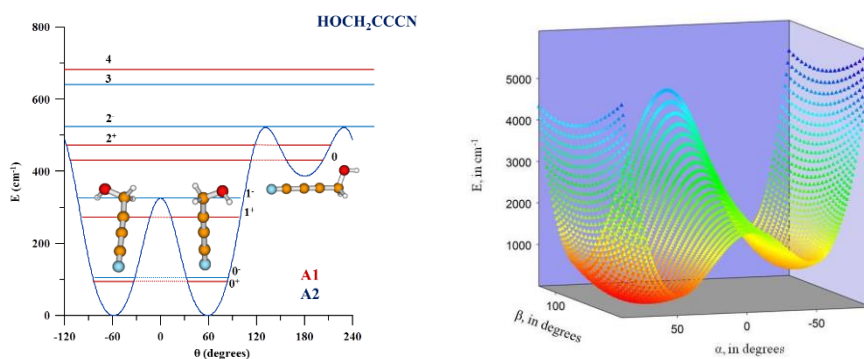
El grupo emplea métodos ab initio altamente correlacionados para caracterizar especies moleculares y procesos químicos de interés astrofísico, para describir nuevos materiales con aplicación a la captación y almacenamiento de CO_2 y para la determinación de los estados electrónicos de Rydberg y disociativos de radicales orgánicos.

Durante el año 2018, hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en dos sub-líneas de investigación: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas. 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. 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 incluyendo la terrestre. Durante estos últimos años, se ha centrado la investigación en el estudio de cianuros orgánicos.

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 fulerenos. 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 2018, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_3H y del C_5H en colaboración con investigadores de la USTHB de Argelia. En colaboración con el laboratorio de Astrofísica del Instituto de Física de Rennes y dentro del proyecto AnionCOS estamos estudiando aniones de pequeñas cadenas carbonadas. 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 estados electrónicos, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización, así como intersecciones cónicas y efectos rovibrónicos. Hay que destacar el estudio de todos los isómeros de los radicales C_3H y C_5H . Se han estudiado formas neutras y con carga. Los aniones son relevantes

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 2018, se ha prestado atención especial a las moléculas orgánicas de gran complejidad que presentan enlaces de hidrógenos intramoleculares, como el etilenglicol. En colaboración con el laboratorio de microondas de la Universidad de Lille, se han estudiado varios cianuros orgánicos como el NC-CCC-CH₂OH. También se ha dedicado atención a la metil-amina.



Se han finalizado los últimos estudios que se han realizado en el marco de Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, se refieren a la interacción del CO_2 y de contaminantes 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. Durante 2018, hemos enfatizado en el estudio de la competencia entre el CO_2 y otros gases de efecto invernadero (NF_6 , CH_4) al ser captados por la ZIF's.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estructura nuclear a energías intermedias.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de la estructura nuclear en reacciones con núcleos exóticos y estables a energías bajas, medias y relativistas.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot para experimentos de Física Nuclear.
- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Instrumentación avanzada.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL, en la instalación ISOLDE y REXISOLDE@CERN.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativísticas en el experimento R3B@GSI.
- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Espectroscopia Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Física Teórica y Matemática.

LABOR INVESTIGADORA

En 2017 el grupo ha iniciado un proyecto en colaboración con la Dr. María Pilar de Lara-Castells y sus colaboradores centrado en el estudio multiescala desde primeros principios de sistemas y procesos de interés en nanociencia. Es una continuación natural de líneas de investigación realizadas en el grupo en los últimos años. A este respecto, las investigaciones del grupo tienen relevancia en áreas sociales como la energía, catálisis, los nuevos materiales y la industria de la ciencia, con un énfasis en la reducción del impacto medioambiental.

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 ya que por encima de los 33 K el Hidrógeno molecular es supercrítico, esto es, es imposible condensarlo cualquiera que sea la presión. Sólo mediante un confinamiento extremo, comparable al tamaño molecular, se puede superar esta restricción termodinámica. Durante 2018 hemos completado un estudio experimental sobre la cristalización unidimensional del deuterio molecular bajo dicho confinamiento extremo dentro de nanotubos de carbono con resultados muy prometedores.

El reciente desarrollo de agregados estables de unos pocos átomos metálicos (*atom-clusters*), ha abierto una plétora de potenciales aplicaciones. Durante 2018 hemos demostrado a nivel teórico (mediante cálculos “Ab initio” avanzados) como la implantación de *atom-clusters* de plata sobre superficies de óxido de titanio cambia su respuesta fotónica haciéndola sensible a la luz natural.

FENOMENOLOGIA VITREA EN CRISTALES CON MINIMO GRADO DE DESORDEN

En esta línea se colabora con el grupo del Prof. Josep Tamarit de la Universidad Politécnica de Barcelona. El esfuerzo desde hace algún tiempo se ha centrado en el estudio de sistemas cristalinos los cuales, debido a la presencia de algún tipo de desorden, presentan, al menos en parte, la misma fenomenología que exhiben los medios desordenados en sus propiedades térmicas, mecánicas o dieléctricas a baja temperatura. Tal desorden puede ser de naturaleza estática, generado p. ej. por diferencias en la estadística de distribución de algún sustituyente, o de naturaleza puramente dinámica. El objeto de esta línea de investigación radica en que estos materiales, al presentar un tipo de desorden cuantificable, permiten identificar de forma inequívoca las entidades microscópicas capaces de acoplarse al campo acústico y generar los fenómenos que dan lugar a las anomalías antes mentadas (sistemas de dos niveles, modos “blandos” etc.).

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

A día de hoy, los esfuerzos investigadores en esta línea se centran en la fuente Europea de Neutrones por Espalación, actualmente en fase inicial de construcción. En 2018 se han completado estudios de daño por radiación en los elementos de generación neutrónica del blanco, así como en partes estructurales, lo cual ha permitido estimar el tiempo de vida en operación del blanco.

ENSAR2- PASPAG APLICACIÓN A LA DETECCIÓN SIMULTÁNEA DE RADIACIÓN DE PARTÍCULAS Y RAYOS GAMMA.

(O. Tengblad, Irene Marroquín, Miguel García Castaño, E. Nácher, A. Perea)

Dentro la colaboración de PASPAG explotamos nuevos materiales de centelleo y exploramos nuevas técnicas y conceptos como detectores Phoswich y centelladores segmentados o híbridos para desarrollar la capacidad de detectar simultáneamente rayos gamma de alta energía, neutrones y partículas cargadas. El énfasis está en un enfoque modular tanto en los cristales de centelleo y foto-sensores como en la electrónica donde el rendimiento mejorado y el procesamiento efectivo de los datos permitirán dispositivos compactos escalables.

También tratamos de sacar esta tecnología de la ciencia básica para que pueda ser explotada para aplicaciones sociales, por ejemplo, en las áreas de medicina nuclear y seguridad nacional. Dependiendo de las aplicaciones, las características como la resolución de energía, la sensibilidad de posición, la capacidad de alta velocidad y la insensibilidad a los campos magnéticos o la dureza de la radiación tienen una importancia diferente.

PASPAG se organiza en diferentes tareas, fuertemente conectadas entre sí, que van desde la identificación y caracterización de nuevos materiales (TAREA 1) hasta la construcción de prototipos phoswich de pequeño tamaño (TAREA 2) y detectores híbridos (TAREA 3), para ser utilizados en aplicaciones. Durante este año nuestro grupo hemos centrado el trabajo en la tarea 3.

TAREA 3 - Arrays híbridos y sus aplicaciones: en esta parte del proyecto investigamos matrices de detectores híbridos. Por conjuntos híbridos, nos referimos a conjuntos altamente segmentados de diferentes materiales de

centelleo, y también al uso combinado de foto-sensores en el mismo paquete de detectores, por ejemplo, la sensibilidad de posición lograda con SiPMs en un lado y un PMT en el otro para obtener la mejor energía o resolución de tiempos. Este capítulo también abordará las aplicaciones sociales fuera de la investigación fundamental. Dichas aplicaciones abarcan una amplia gama desde imágenes médicas hasta seguridad nacional. La colaboración de PASPAG está orientada a las aplicaciones sociales, especialmente en el caso de Seguridad Nuclear, apuntamos a un dispositivo detector ligero y compacto que pueda ser transportado por un vehículo no tripulado (control remoto) para mediciones en áreas de alta radiación. En el laboratorio del IEM hemos estado trabajando en una computadora de tamaño pequeño ($2 \times 5 \times 10 \text{ cm}^3$) con sistemas de ubicación geográfica y sello de tiempo incorporados para la comunicación inalámbrica a una estación base. Además, estamos acoplando este dispositivo a nuevos materiales de centelleo con identificación gamma-n que no son sensibles a la humedad, están surgiendo campos magnéticos, junto con sensores alimentación de baja consumo como SiPM.

IS633: CAPTURA ELECTRÓNICA DEL ^8B A LOS ESTADOS EXCITADOS DE ALTA ENERGÍA DEL ^8Be

(Doctorando Silvia Viñals i Onsès, Olof Tengblad)

El experimento IS633 tiene como objetivo estudiar el doblete 2^+ a 16.6 y 16.9 MeV del núcleo ^8Be poblados mediante la desintegración β^+ y la captura electrónica (EC) del ^8B respectivamente. Además, es de interés la emisión retardada del protón del estado de energía de 17.6 MeV, que no ha sido observado con anterioridad y daría evidencias de la estructura de halo del núcleo ^8B . Asumiendo una factorización de la función de onda de éste núcleo en $^7\text{Be}+p$, se establece un límite superior en la razón de ramificación de $2.3 \cdot 10^{-8}$.

El experimento se dividió en dos partes. La primera se centró en el estudio del doblete (explicada en la memoria del año anterior) y la segunda se dedicó a determinar un límite experimental en la razón de ramificación del estado de 17.6 MeV. La dificultad de esta segunda parte es doble: por una parte, el extremadamente bajo límite teórico en la razón de ramificación y por otra parte, la baja energía del protón, alrededor de 337 keV. En esta memoria se discute esta segunda parte.

El experimento se llevó a cabo en la instalación ISOLDE-CERN en la línea LA1. El haz fue producido a partir de la colisión de protones de 1.4 GeV en nanotubos de carbono y fue enviado a la cámara de detección como una molécula de $^8\text{BF}_2$ para reducir contaminación y mejorar la transmisión del núcleo de interés. El haz se implantó en una lámina de carbono ($20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) rodeada por un sistema de detección muy compacto (ver Fig.1) optimizado para tener un espectro libre de fondo en la región de 200 a 400 keV. El montaje experimental está formado por un detector de silicio, ΔE , de $30 \mu\text{m}$ con una respuesta β negligible. En frente de éste, otro detector de silicio, PAD, que cubre 3 veces el ángulo sólido del ΔE para asegurar un 100% de coincidencia. Por último, detrás del detector ΔE , otro detector de silicio con una respuesta β muy alta para eliminar las α y β que pasen del ΔE .

Mediante el uso de un análisis de anti-coincidencia, el fondo en la región de interés se reduce un factor 10^3 . En la Fig.2 puede verse el espectro sin procesar (azul) y el espectro una vez se ha aplicado la condición de anti-coincidencia (rojo) para el detector ΔE . Se aprecia claramente como la respuesta α y β del detector ΔE es eliminada a pesar de que aún es necesario un algoritmo mejor que consiga limpiar más la región alrededor de 300 keV. Con el análisis hecho a día de hoy, se puede establecer un límite superior experimental para la razón de ramificación del estado de 17.6 MeV de $4.4 \cdot 10^{-6}$.

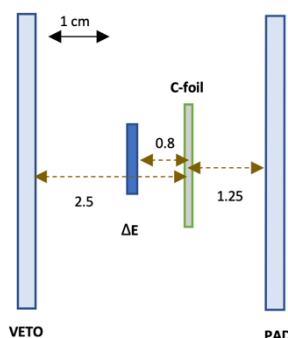


Fig.1: Esquema del montaje experimental del experimento IS633.

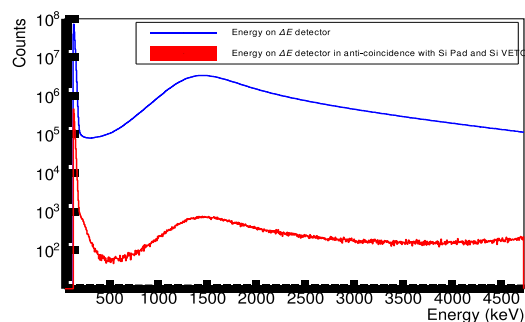


Fig.2: En azul, toda la estadística del detector ΔE sin analizar. En rojo, el resultado de aplicar la anitcoincidencia con los detectores PAD y VETO.

DISPERSIÓN DE ^{15}C A ENERGÍAS EN TORNO A LA BARRERA DE COULOMB CON BLANCOS PESADOS EN HIE-ISOLDE, CERN.

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

Estudios a alta energía (~ 100 MeV/u) han sugerido previamente una estructura de halo para el isótopo débilmente ligado de ^{15}C . El proceso de colisión a estas energías es sensible a su estructura de partícula independiente y la presencia de un halo produciría una distribución de momentos estrecha para la separación de un neutrón y una sección eficaz total mucho mayor en comparación con los isótopos de carbono contiguos $^{14,16}\text{C}$. Sin embargo, a bajas energías de colisión (~ 5 MeV/u), la dinámica del sistema estaría dominada por grados de libertad colectivos y se caracterizaría por el acoplo entre los canales elástico, de transferencia y de ruptura, además de los efectos del continuo. La estructura de halo se manifestaría entonces como un patrón de absorción en la sección eficaz diferencial elástica y la supresión del arco-iris nuclear.

Con el objetivo de probar esta estructura de halo debatida, el primer estudio dinámico de ^{15}C a energías en torno a la barrera Coulombiana se llevó a cabo en agosto de 2017 en HIE-ISOLDE, CERN. Para este propósito, se produjo, purificó y aceleró un haz de $^{15}\text{C}^{5+}$ ($A/Q=3$) hasta los 4.37 MeV/u y se hizo incidir sobre un blanco de ^{208}Pb . La medida de los iones dispersados resultantes de la colisión se realizó con el detector GLORIA, consistente en seis telescopios de silicio fragmentados rodeando el blanco de la reacción. Estos detectores tienen un grosor de 40 μm (parte delantera del telescopio) y de 1 mm (parte trasera), cubren ángulos desde 15° hasta 165° en sistema laboratorio y presentan una eficiencia geométrica del 25%.

El análisis en progreso, está enfocado en obtener la sección eficaz diferencial elástica de la reacción, agrupando los pixeles de los detectores en grupos dentro de un ángulo de dispersión promedio $\theta \pm \Delta\theta$. Las representaciones bidimensionales de los telescopios permiten distinguir los diferentes iones y canales de reacción y por tanto pueden ser separados e integrados para cada intervalo angular.

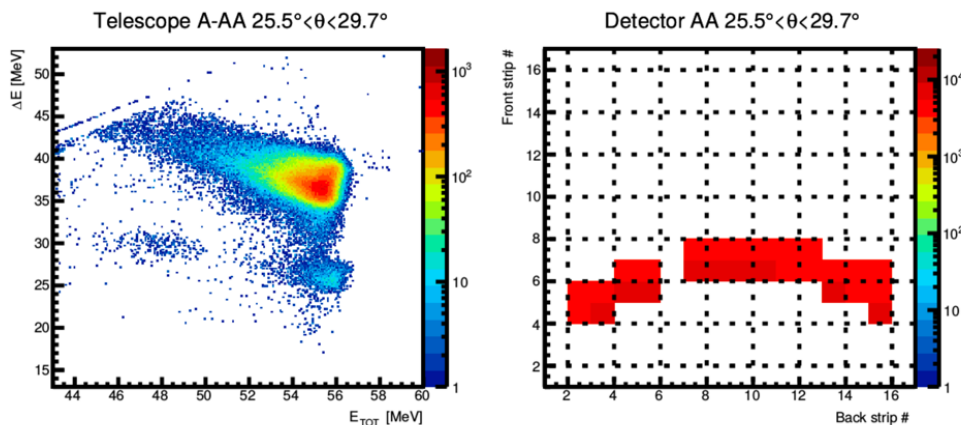


Figura 1. Dibujo bidimensional (izquierda) obtenido de un conjunto de pixeles (derecha) dentro del mismo intervalo angular de un telescopio de GLORIA. Se observan las dos regiones correspondientes a la dispersión elástica de ^{15}N y ^{15}C (ambos presentes en el haz del experimento).

EXPERIMENTO NP1306-RIBF98R1: ESPECTROSCOPIA GAMMA EN HAZ DE NÚCLEOS EN LA REGIÓN DEL ^{132}Sn @ RIKEN.

(Proyecto FPA2014-57196-C5-4-P, doctorando FPI2015 Víctor Vaquero, Andrea Jungclaus)

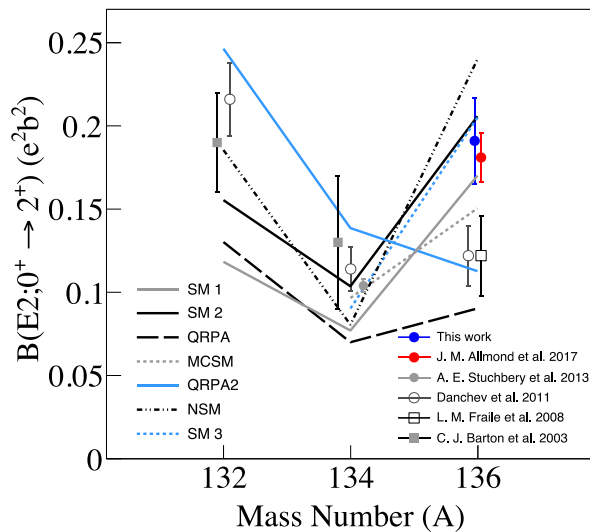
Durante el año 2018 se ha finalizado el análisis e interpretación de los datos tomados en abril del 2015 en un experimento de espectroscopía en haz llevado a cabo en el RIKEN Nishina Center (Japón). Esto ha dado lugar a dos nuevas publicaciones:

- **V. Vaquero, A. Jungclaus, et al., Phys. Rev. C, 99:034306, 2019** - Artículo en el cual se ha estudiado en detalle la excitación Coulombiana del isótopo ^{136}Te con el objetivo de determinar la probabilidad de transición reducida $B(E2)$ del primer estado excitado 2^+ . Además, se ha realizado un estudio detallado de la forma de la sección eficaz diferencial y se ha establecido un límite para la $B(E2)$ de un posible estado 2^+ con carácter mezcla de simetría. En la imagen se muestra una comparativa entre el valor de $B(E2)$ obtenido por nuestro grupo y el resto de valores experimentales y teóricos.

- **V. Vaquero, A. Jungclaus, et al., Submitido a Physics Letters B en febrero 2019**- Artículo en el cual se ha estudiado una amplia sistemática de secciones eficaces experimentales para distintas reacciones de pérdida de nucleones. Esta sistemática experimental se ha comparado con diferentes modelos de reacción y es de gran interés en el campo de la física nuclear de reacciones.

Estos dos artículos, junto con la primera publicación en la prestigiosa revista Physical Review Letters (V. Vaquero, A Jungclaus, et al. Phys. Rev. Lett. 118, 202502 (2017)), forman parte de la tesis doctoral “**Espectroscopía de rayos**

gamma en haz en la región alrededor del núcleo doblemente mágico ^{132}Sn de Víctor Vaquero, la cual fue defendida el 16 de noviembre de 2018 en la Universidad Autónoma de Madrid.



Valores experimentales de $B(E2)$ para los isótopos $^{132,134,136}\text{Te}$ junto con las predicciones teóricas. El valor de $B(E2)$ obtenido por nuestro grupo es representado por el punto azul.

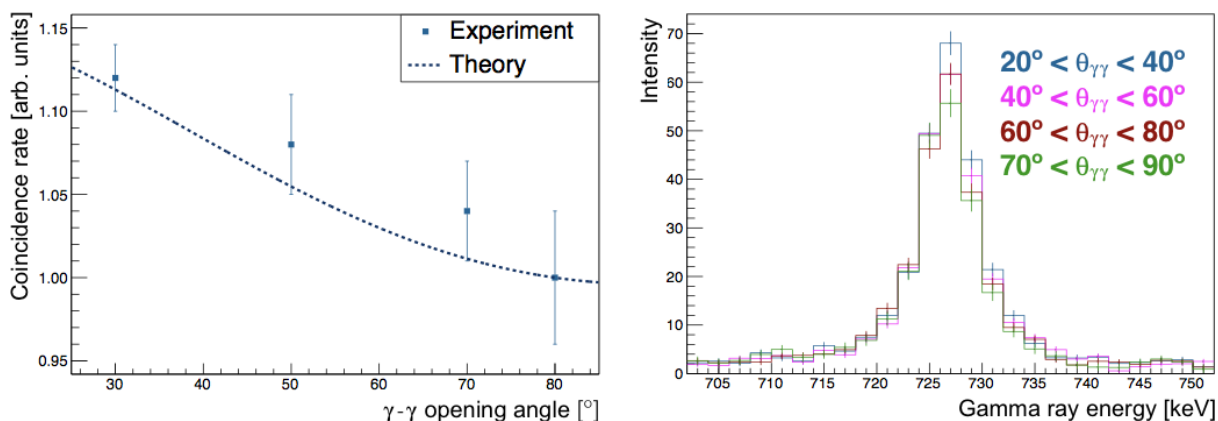
EXPERIMENTO E693: ESTUDIO DE ESTRUCTURAS A-CLUSTER EN EL NÚCLEO ^{212}Po CON AGATA@GANIL

(Doctorando Álvaro Fernández, Andrea Jungclaus)

Experimentos recientes de espectroscopía gamma del núcleo ^{212}Po apuntan a que no solo sus propiedades de desintegración alfa son explicables a partir de las intensas correlaciones alfa-cluster entre sus nucleones de valencia; dichas correlaciones serían también responsables de las elevadas probabilidades de transición dipolares eléctricas encontradas entre algunos de sus estados excitados. Con el objetivo de entender mejor la estructura nuclear del ^{212}Po , el experimento E693 se llevó a cabo en mayo de 2017 en las instalaciones del laboratorio de GANIL (Francia) con el objetivo de medir la vida media de varios estados excitados del ^{212}Po mediante la técnica de atenuación por efecto Doppler (Doppler Shift attenuation method, DSAM). El dispositivo experimental estaba compuesto por el espectrómetro gamma AGATA y un detector segmentado de partículas cargadas con simetría cilíndrica (Double-Sided Silicon Strip Detector, DSSSD) para la detección de los productos ligeros de la reacción. El dispositivo experimental se escogió para maximizar la sensibilidad en la determinación de vidas medias mediante DSAM.

En 2018 hemos continuado con el análisis de los datos tomados en el experimento. En este resumen se describe el análisis de las correlaciones angulares gamma-gamma, uno de los varios aspectos tratados durante el análisis.

Cuando un estado excitado nuclear inicial se desexcita para alcanzar el estado fundamental mediante dos transiciones electromagnéticas correspondientes a la despoblación de un estado inicial y la población de un estado final a través de un estado excitado intermedio, existe una correlación entre las direcciones en las que se emiten los 2 fotones. La distribución de probabilidad que gobierna el ángulo de apertura entre ambos depende del momento angular de los tres estados excitados de la cascada, así como de la multipolaridad de la radiación emitida. Esta correlación proporciona por tanto una herramienta muy útil para estudios de estructura nuclear mediante espectroscopía gamma. Sin embargo, esta correlación se observa atenuada cuando se usan detectores de Germanio no sensitivos a la posición de las interacciones dentro del cristal, y frecuentemente se emplean dispositivos experimentales específicamente diseñados para explotar esta técnica. Sin embargo, la resolución espacial sin precedentes de AGATA junto con el elevado número de cristales que componían el espectrómetro durante el experimento permite la aplicación de esta técnica a los datos tomados en el experimento E693. Para este estudio, se han extendido las técnicas de análisis propuestas para espectrómetros gamma compuestos por un gran número de cristales. En la figura de abajo se muestran los resultados preliminares para la cascada $4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$, despoblando los primeros estados excitados del ^{212}Po . La probabilidad de coincidencia obtenida para los dos gammas emitidos en la cascada, es un 12(2)% superior a ángulos de apertura entre 20° y 40° que entre 70° y 90° , en buena concordancia con el 11% esperado de la teoría. Este análisis se puede usar ahora para para confirmar y revisar asignaciones previas en la literatura de espín y multipolaridades de las transiciones en el ^{212}Po .



Izquierda: Probabilidad de coincidencia como función del ángulo de apertura entre las dos gammas de la cascada $4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$ en el ^{212}Po , relativa al valor entre 70° y 90° . La línea de puntos representa la predicción de la teoría. **Derecha:** Ilustración de la intensidad de la transición $2^+ \rightarrow 0^+$ en el ^{212}Po cuando se observa en coincidencia con la línea desdoblado el primer estado excitado 4^+ , para varios ángulos de apertura entre las dos gammas.

PROPIEDADES ÓPTICAS DE METASUPERFICIES DE NANOHILOS SEMICONDUCTORES.

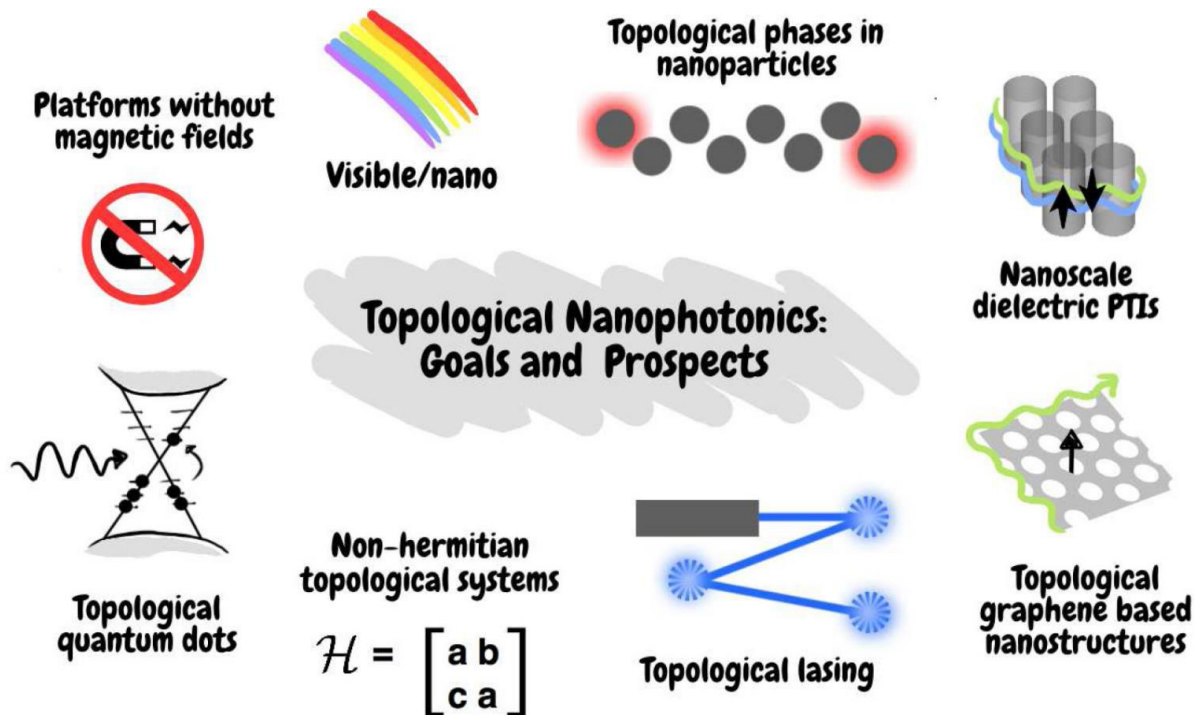
Se sabe que la interferencia entre campos dipolares eléctricos y magnéticos conduce a distribuciones angulares asimétricas de la intensidad dispersada de nanopartículas de alto índice de refracción (HRI, del inglés), como los semiconductores en el visible. Se ha demostrado que las metasuperficies totalmente dieléctricas basadas en esferas HRI tienen una reflectividad nula, es decir, un efecto de Brewster generalizado, potencialmente para cualquier ángulo, longitud de onda y polarización de elección. En incidencia normal, el efecto se relaciona con la ausencia de retrodispersión de esferas o discos dieléctricos pequeños en la llamada primera condición de Kerker. En contraste, los cilindros HRI homogéneos no cumplen la primera condición de Kerker debido a la falta de coincidencia entre las densidades eléctrica y magnética local de estados. En esta línea de investigación, mostramos que la interacción dipolar en cilindros HRI conduce a una condición de Kerker anómala y, a su vez, a un efecto de Brewster generalizado en una metasuperficie basada en nanohilos semiconductores. Derivamos una formulación analítica de dipolo eléctrico y dipolo magnético (CEMD) para describir las propiedades de una serie periódica de nanohilos semiconductores en total acuerdo con cálculos numéricos exactos. Trabajo desarrollado en colaboración con el Donostia International Physics Center, apoyado por el proyecto LENSBEAM de Excelencia MICIU.

RESONANCIAS PLASMÓNICAS: CALENTAMIENTO Y DIAGNÓSTICO ÓPTICO

Hemos continuado nuestro trabajo sobre plasmónica, con especial interés en el potencial para calentamiento óptico y para diagnóstico no invasivo de nanopartículas metálicas con fuertes resonancias de plasmón de superficie localizado. El tremendo impacto que tienen las enfermedades cardiovasculares en la sociedad moderna está motivando la investigación de nuevas técnicas de imagen que harían posible un diagnóstico temprano y, por lo tanto, tratamientos eficaces. La tomografía de coherencia óptica cardiovascular (CV-OCT, del inglés) surgió como resultado de tal demanda y ya se ha utilizado a nivel clínico. La utilización completa de CV-OCT requiere el desarrollo de nuevos agentes moleculares de contraste caracterizados por una gran eficiencia de dispersión en el infrarrojo (800-1400 nm). Las nanopartículas de oro (GNP, del inglés) parecen ser los mejores candidatos, pero sus propiedades de dispersión en el IR son apenas conocidas. Esta línea de investigación tiene como objetivo proporcionar una evaluación experimental de las propiedades espectrales de diferentes GNPs (nanoshells, nanostars y nanorods), con notables coeficientes de extinción en la 1ª y 2ª ventanas biológicas, incluida la longitud de onda particular del CV-OCT. Utilizamos una combinación única de técnicas (experimentos de carga térmica, IR-OCT, microscopía de campo oscuro y espectroscopia optoacústica) para determinar experimentalmente la eficiencia de dispersión en tres longitudes de onda NIR diferentes (808, 980, 1280 nm) en la 1ª y 2ª ventanas biológicas, junto con cálculos numéricos avanzados. Trabajo desarrollado en una amplia colaboración con diversos grupos en la que proporcionamos la comprensión teórica de las propiedades ópticas de GNP, en línea con el proyecto LENSBEAM de Excelencia MICIU.

NANOFOTÓNICA TOPOLÓGICA

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



NANOFABRICACIÓN

La fabricación de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas es uno de los objetivos más importantes de nuestro grupo. La interacción de nanopartículas plasmónicas de oro y plata con luz de apropiada longitud de onda genera una alta intensificación de campo eléctrico, lo que puede ser utilizado para detección molecular por Raman o Fluorescencia. Es por ello que durante este periodo se han desarrollado métodos de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y también 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 dan 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). Se ha prestado una mayor atención a la fabricación de nanoestrellas de plata, ya que 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. A lo largo del año 2018 se han mejorado los métodos de fabricación de nanopartículas, profundizando en la caracterización del potencial eléctrico de las superficies.

En colaboración con investigadores del Instituto de Óptica, se está llevando a cabo la obtención de superficies nanoestructuradas de Ag y Au obtenidas sobre superficies modificadas mediante procesado láser. Uno de los métodos empleados es el de deposición por láser pulsado (PLD) que da lugar a superficies de altas prestaciones en plasmónica. Se están llevando a cabo estudios conducentes a la optimización de estos procesos de deposición.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas es también una línea importante de investigación y se le ha seguido prestando especial atención durante 2018. 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 están empleando ensambladores con cavidades internas o cavitands, como ciclodextrinas funcionalizadas con grupos tioles, que aumentan la adsorción de estos compuestos sobre la superficie. También se están ensayando otro tipo de cavitands de gran interés: los calixarenos. Estos compuestos se fabrican mediante métodos diversos, dando lugar a diferentes estructuras que se están ensayando sobre superficies nanoestructuradas. La síntesis de estos calixarenos se está produciendo en la Universidad de Chile, laboratorio con el cual se tiene una colaboración a través de un proyecto iCOOP.

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

Las superficies obtenidas mediante nanofabricación se han aplicado en la detección de sustancias contaminantes, fundamentalmente pesticidas de difícil degradación. Primeramente, se están desarrollando protocolos de detección para sustancias que no necesitan funcionalización de las superficies, debido a que pueden interactuar directamente con la superficie. La funcionalización mediante ciclodextrinas y calixarenos se ha aplicado en el ensamblaje y detección de POPs (persistent organic pollutants) que no poseen grupos químicos activos capaces de interactuar con el metal.

APLICACIÓN DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL CONVENCIONAL Y DE SUPERFICIE AL ANÁLISIS DE BIOMOLÉCULAS

Se ha avanzado en el estudio de la adsorción de péptidos terapéuticos con nanopartículas plasmónicas. Esta línea de trabajo proyecta la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad y su especificidad biomolecular, así como la sensibilidad en la detección y biodiagnóstico. Se ha analizado la adsorción de los péptidos octreotido, lanreotido y pasireotido sobre superficies de plata y de oro, estudiándose el mecanismo de interacción de estos fármacos. A tal efecto, se han estudiado moléculas modelo de estos péptidos que contienen las tríadas de aminoácidos capaces de interactuar con la superficie.

Se ha concluido un estudio consistente en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. Para ello se han empleado muestras llamadas “standard”, por ser las que son accesibles comercialmente y se usan en muchos laboratorios. La funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas se ha empleado con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad, lo que 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).

En colaboración con Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, se está desarrollando una metodología de análisis de huesos basado en la aplicación de la técnica Raman.

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

Se ha avanzado en la línea de investigación dedicada al estudio del patrimonio. Concretamente en lo que respecta al análisis de colorantes orgánicos de difícil análisis mediante Raman convencional. Dentro de esta línea de trabajo, se ha perfeccionado la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser sobre fibras de lana con el fin de realizar un análisis in-situ de colorantes. Esta investigación se está realizando en colaboración con la Universidad de Bolonia. El empleo de este tipo de sustratos metálicos es muy interesante para el análisis in situ 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 evidente en el mismo. Se ha visto que 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. Las nanopartículas preparadas se han empleado para analizar colorantes sintéticos sobre fibras patrón de lana teñidas y sobre muestras reales.

Las técnicas de fotorreducción in-situ y la simple deposición de nanopartículas con forma de estrella sobre fibras históricas del patrimonio histórico chileno han permitido detectar la presencia de otras moléculas de origen biológico en aquellas muestras que contenían cochinilla. Este hallazgo permite obtener importante información arqueológica acerca de las prácticas empleadas en los procesos de tinción.

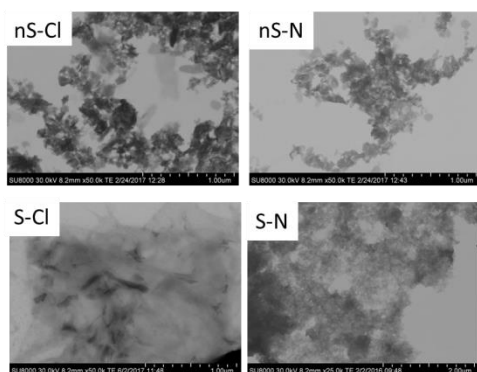
Dentro de esta línea de investigación, se ha comenzado una colaboración con los responsables científicos del Museo Metropolitano de Nueva York para el estudio de colorantes pictóricos de grabados japoneses de la época Edo y Meiji. El objetivo de esta investigación es el de analizar la composición de los colorantes y relacionarlos finalmente con los diferentes procesos históricos vividos en el país nipón durante el siglo XIX. También se ha abierto una línea nueva en colaboración con investigadores de la Universidad UCLA de Los Ángeles para aplicación de SERS en el análisis de muestras de interés histórico en el Museo J. Paul Getty de esa ciudad.

MATERIALES ARTIFICIALES DEL PATRIMONIO: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN

Finalmente, durante el año 2018 se ha continuado con el estudio de materiales de construcción relacionados con el Patrimonio Histórico. El principal componente de los ligantes utilizados en restauración desde el siglo XIX es el silicato cálcico hidratado (C-S-H) cuyas propiedades dependen de su nanoestructura y de su composición, esta última en términos de relación Ca/Si. Partiendo de reactivos de diferente naturaleza y microestructura se ha determinado el tamaño de las nanopartículas de silicato cálcico hidratado formado, siendo menor si el material inicial es de naturaleza nanométrica, lo que también influye en la morfología de las nanopartículas. Siguiendo la metodología de síntesis del C-S-H se está explorando la posibilidad de sintetizar AgNPs soportadas en silicato cálcico hidratado. Estos compuestos serían biocompatibles y por lo tanto se estudiará su posible utilización como agentes transportadores de fármacos. Las variables a estudiar son la concentración de Ag, la temperatura y la presencia de aluminio en el silicato cálcico hidratado. Actualmente se ha logrado sintetizar silicato cálcico hidratado con partículas de Ag.

En colaboración con el IETCC se trabaja en la aplicación de Micro-Raman y SERS al estudio de la interacción aditivos/pasta de cemento, lo que permitirá profundizar en los fenómenos de adsorción de los aditivos, variación de la cinética de formación y morfología de los productos de reacción.

El principal componente de los ligantes utilizados en restauración desde el siglo XIX es el silicato cálcico hidratado (C-S-H) cuyas propiedades dependen de su nanoestructura y de su composición, esta última en términos de relación Ca/Si. Partiendo de reactivos de diferente naturaleza y microestructura se ha determinado el tamaño de las nanopartículas de silicato cálcico hidratado formado, siendo menor si el material inicial es de naturaleza nanométrica, lo que también influye en la morfología de las nanopartículas.



TEM de silicato cálcico hidratado con diferentes reactivos: a) nanosílice y CaCl_2 ; b) nanosílice y $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; c) Na_2SiO_3 y CaCl_2 y d) Na_2SiO_3 y $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$.

Siguiendo la metodología de síntesis del C-S-H se está explorando la posibilidad de sintetizar AgNPs soportadas en silicato cálcico hidratado. Estos compuestos serían biocompatibles y por lo tanto se estudiará su posible utilización como agentes transportadores de fármacos. Las variables a estudiar son la concentración de Ag, la temperatura y la presencia de aluminio en el silicato cálcico hidratado. Actualmente se ha logrado sintetizar silicato cálcico hidratado con partículas de Ag.

En colaboración con el IETCC se trabaja en la aplicación de Micro-Raman y SERS al estudio de la interacción aditivos/pasta de cemento, lo que permitirá profundizar en los fenómenos de adsorción de los aditivos, variación de la cinética de formación y morfología de los productos de reacción.

En colaboración con Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, se está desarrollando una metodología de análisis de huesos basado en el estudio de los espectros Raman.

2A.3. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y baja presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Generación de plasmas fríos con descargas de radiofrecuencia en gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopía de emisión de plasmas en las regiones visible y milimétrica.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga eléctrica.
- Espectroscopía Raman lineal y estimulada.
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.
- Criogenia.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

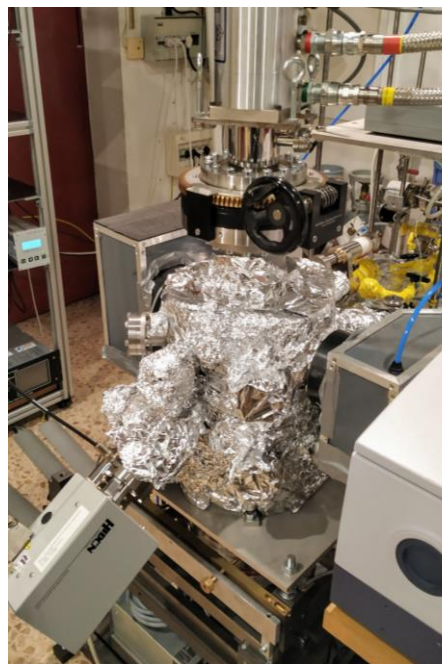
LABOR INVESTIGADORA

FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Hielos astrofísicos

Uno de nuestros objetivos es la generación de hielos similares a los que se encuentran en distintos entornos astrofísicos, como las superficies de granos de polvo del medio interestelar, las superficies frías de objetos lejanos de nuestro sistema solar, o en los núcleos de cometas. Estos hielos están formados mayoritariamente por especies sencillas como H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, y otras especies minoritarias neutras o iónicas, adsorbidas o incluídas. En particular durante el año 2018 nos centramos en el estudio de hielos de agua y de hidrocarburos ligeros, como CH₄ y CH₃OH. En el laboratorio de hielos registramos espectros NIR y MIR de las especies puras y mezclas binarias de H₂O y CH₄ a 30 K, analizando los cambios observados en los espectros de las mezclas respecto a los de las especies puras (desplazamientos de frecuencia, cambios de intensidad). Adicionalmente, y en colaboración con el grupo del profesor M. A. Satorre de la Universidad Politécnica de Valencia en Alcoy, con el que tenemos un Proyecto Coordinado del MINECO, hemos obtenido las densidades y constantes ópticas en el infrarrojo medio y cercano de hielos de CH₃CH crecidos a temperaturas entre 20 K y 130 K. Se obtuvieron fases amorfas y cristalinas de hielo de metanol con diferentes características espectrales y densidades que varían entre 0.6 g/cm³ y 0.8 g/cm³. Esta información es relevante para la interpretación de observaciones astrofísicas de estos hielos.

Durante el año 2018 hemos realizado experimentos de test en la nueva cámara de ultra alto vacío. En esta cámara alcanzamos presiones residuales de 10^{-10} mbar. Este sistema nos permite estudiar la interacción de moléculas con superficies frías, y reacciones superficiales. Hemos realizado experimentos preliminares de desorción térmica programada de hielos de CH_4 crecidos sobre una superficie de Al o de agua amorfa. El siguiente paso es utilizar superficies de material carbonáceo o silíceo, análogas a las de los granos de polvo del medio interestelar. Desde el punto de vista teórico hemos estudiado la formación de moléculas de agua en una superficie de silicato. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo de Albert Rimola de la Universidad Autónoma de Barcelona, fruto de una estancia de tres meses en dicha universidad de Germán Molpeceres en 2017.



La detección de isocianato de metilo (CH_3NCO) en medios astrofísicos ha disparado el interés sobre esta especie. Hemos continuado nuestra colaboración con J.C. Guillemin, de Rennes (Francia) y J. Cernicharo (IFIC, CSIC). Nuestro trabajo inicial, publicado en 2017, se ha completado con la publicación de un nuevo artículo en 2018 en el que se estudia la estabilidad del hielo de esta molécula bajo procesado con fuentes diferentes que simulan las condiciones del medio interestelar.

Hemos continuado nuestra colaboración con el grupo de los profesores N. Watanabe y A. Kouchi del Institute of Low Temperature Science de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón), financiada inicialmente con un Proyecto i-link del CSIC. Nuestra aportación consiste usualmente en desarrollar modelos teóricos para simular las muestras experimentales generadas en los excelentes laboratorios de Japón, y tratar de reproducir los espectros de IR que allí se registran. Durante 2018 hemos trabajado conjuntamente sobre efectos en el espectro IR de radicales generados por irradiación de hielos amorfos de H_2O y HDO, sobre la interacción de superficies de partículas carbonáceas hidrogenadas sobre capas muy finas de hielo amorfo de agua, adsorción de metanol sobre hielo amorfo de agua, y también, sobre cálculos de nanopartículas de óxidos de aluminio. Esta última línea ha dado lugar a una publicación en 2018.

Dentro de la colaboración habitual con el Dr. Pedro Gómez de la U. Complutense a través de la vigente Unidad Asociada en la que estamos incluidos, continuamos trabajando en una línea encaminada a predecir espectros en la zona de IR próximo de sólidos amorfos, como los hielos de mezclas de hidrocarburos con agua. El objetivo es comparar esos espectros con los que se obtienen en misiones astronómicas principalmente en el sistema solar, y, en particular, de la sonda New Horizons de la NASA, que ha permitido obtener unos resultados observacionales espectaculares sobre Plutón y Caronte. Esta línea de trabajo se ha complementado con una nueva colaboración con el Prof. Emilio Artacho, del Cavendish Laboratory de Cambridge (Reino Unido), donde ha realizado una estancia de tres meses de sabático R. Escribano en 2018. Sobre este tema tenemos un manuscrito listo para enviar a publicar.

Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, y como continuación de los experimentos demostrativos de la viabilidad de la técnica, publicados en 2018 en Astronomy & Astrophysics, hemos colaborado en la instalación y puesta en marcha de un laboratorio de Astrofísica Molecular en el Observatorio Astronómico de Yebes para estudiar en un reactor químico la emisión rotacional de moléculas de interés astrofísico mediante espectroscopía milimétrica. El nuevo laboratorio dispone de detectores en las bandas Q(31.5-50 GHz) y W(72-116 GHz) del espectro radiativo, con 38 kHz de resolución, así como de un reactor donde los gases introducidos pueden ser estudiados a bajas presiones en estado neutro, o fotodisociados con lámparas UV, o ionizados y disociados por electrones en descargas de radiofrecuencia acopladas inductivamente, dando lugar a nuevas especies. Dicho laboratorio ya se encuentra plenamente operativo y proporcionando resultados muy interesantes, algunos de los cuales ya se encuentran en vías de publicación.

Se han continuado, en colaboración con F. J. Aoiz y J. E. Verdasco de la UCM (Unidad Asociada) y con V Sáez Rábanos de la UPM, los estudios de dinámica cuántica de las reacciones $\text{O}(3P)+\text{H}_2$ y $\text{F}+\text{HD}$ a muy baja temperatura. En la primera de estas reacciones se indagan cambios mecanísticos en torno al umbral clásico que se reflejan en el desdoblamiento Λ del producto OH, y en la segunda reacción se investiga la presencia de resonancias “de forma” en los dos canales isotópicos de salida.

Se ha continuado el estudio de iones moleculares de interés astrofísico. Como extensión de los experimentos realizados sobre el ion CH^+ , y en colaboración con la Universidad de Colonia (S. Schlemmer & O. Asvany), se han medido con extraordinaria precisión y por primera vez en el laboratorio transiciones de vibración rotación de $^{12}\text{CH}^+$ y $^{13}\text{CH}^+$. Para ello se ha empleado la técnica de “Laser Induced Inhibition of Complex Growth”, en la que la fuente de excitación es un Oscilador Paramétrico Óptico y los iones se confinan en una trampa de radiofrecuencia a temperaturas de ~ 7 K. Asimismo, se han medido las transiciones rotacionales de frecuencia más baja de los isotopólogos del ion amonio NH_3D^+ , NH_2D_2^+ y NHD_3^+ , empleando en este caso una cadena de multiplicadores de frecuencia como fuente de radiación. Si bien para el primero de estos iones ya existían datos previos de laboratorio, para las variantes doble- y triplemente deuteradas, estas son las primeras medidas experimentales directas realizadas. Dada la relevancia del ion amonio en la química del nitrógeno en el medio interestelar como precursor del amoniaco y otros compuestos nitrogenados potencialmente prebióticos, la identificación de estas especies en el ISM es de gran interés en astroquímica. Además, ayudarán a entender el alto enriquecimiento en isotopólogos deuterados (muy por encima de la abundancia cósmica D/H) en nubes frías, cuyo mecanismo no está aún suficientemente comprendido.

En el laboratorio de espectroscopía infrarroja por diferencia de frecuencias se ha comenzado el estudio del ion PH^+ , también de gran relevancia para una posible química prebiótica en el espacio. En este caso, las medidas de transiciones rotacionales en Colonia han resultado infructuosas, por lo que las determinaciones que hagamos de las transiciones vibro-rotacionales en descargas en cátodo hueco en la zona del infrarrojo serán del máximo interés.

Generación, procesado y estudio de películas y partículas de Carbono Amorfo Hidrogenado

Se ha continuado estudiando la formación de compuestos análogos a los del polvo interestelar utilizado plasmas producidos en descargas inductivas de radiofrecuencia con mezclas de He/Ar y $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_2$. Los depósitos de carbono amorfo hidrogenado formados se han caracterizado con espectroscopía infrarroja y se han bombardeado con electrones de 5 keV para simular el efecto de la irradiación con rayos cósmicos, a fin de dilucidar la discrepancia existente en la bibliografía previa. Se ha estudiado la caída de la banda de 3.4 μm en función del flujo de electrones a la muestra y el crecimiento de otras bandas de enlaces C=C que demuestran el cambio de composición del material y la pérdida de hidrógeno. Se han incluido resultados de densidad de los materiales carbonáceos, de microscopía de emisión de electrones secundarios (SEM) y de reflectividad visible-UV. Los resultados se han publicado en la revista PSST.

Se han comenzado a producir y caracterizar nanopartículas carbonáceas de interés astrofísico mediante plasmas de Ar/He y C_2H_2 en un reactor de radiofrecuencias acoplado capacitivamente, diseñado específicamente para tal objetivo. La formación de nanopartículas se manifiesta por las imágenes de dispersión de un haz expandido de radiación láser, recogidas con una cámara CCD y el análisis exsitu del material recogido por espectroscopía infrarroja permite conocer su composición. Los plasmas se han empezado a caracterizar mediante espectroscopía óptica de emisión y espectrometría de masas de iones y neutros.

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos, hemos seguido colaborando en la caracterización espectroscópica de los plasmas generados mediante magnetrones en la máquina Stardust, con el objetivo de contribuir en la simulación experimental de generación de nanopartículas de polvo de distintas composiciones por procesos similares a los que ocurren a nivel interestelar, y hacer un estudio exhaustivo de los mismos. En particular, durante 2018 hemos obtenido y analizado los espectros de emisión óptica de plasmas generados con blancos de grafito, utilizando Ar puro como gas de llenado, o bien añadiendo pequeñas concentraciones de hidrógeno o acetileno. Los resultados están en fase de envío a publicar.

Dentro de la caracterización de sistemas astrofísicos igualmente se ha venido trabajando con filosilicatos, esto es arcillas expansivas que no solo podemos encontrar en el planeta Tierra sino en otros astros del Sistema Solar, tales como el planeta Marte o el planeta enano Ceres. Se ha trabajado desde un punto de vista teórico, mediante simulaciones con métodos de primeros principios, y experimental, con la preparación de muestras y su análisis mediante espectroscopía infrarroja. Estudiamos la interacción con aminoácidos y la posible supervivencia de los mismos una vez adsorbidos por el mineral en entornos hostiles sometidos a una fuerte radiación ultravioleta o térmica. Los filosilicatos utilizados han sido, sobre todo, esmécticas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio, yeso y aragonito. Se ha seguido, manteniendo la colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Durante 2018 hemos continuado con el estudio cuantitativo de flujos de gases fuera del equilibrio. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es factible el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Para ello en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular contamos con dos instalaciones de diagnóstico de chorros de gases y líquidos mediante

espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinticinco años.

Una gran parte del trabajo de este año se ha dedicado a la caracterización del campo de flujo más cercano a la tobera, una región escasa en datos experimentales precisos, y donde el flujo experimenta la transición desde el régimen subsónico confinado dentro de la tobera hasta la expansión supersónica con su flujo radial y ondas de choque. Para ello se han realizado nuevos experimentos de expansiones supersónicas de H₂ a través de una tobera de 325 micras, desde condiciones de estancamiento de 280 mbar y 363 K, cartografiando con precisión la región del primer diámetro de tobera. En concreto, se han medido las densidades y temperaturas rotacionales en 50 cortes radiales de una anchura de ~9 micras, a 6 distancias axiales desde 50 a 350 micras. Estas medidas se han completado con las de las expansiones supersónicas de D₂ natural y orto-D₂ y sus mezclas con He del año pasado. Del análisis de estas medidas se observa que en boca de tobera el flujo supersónico es bastante más estrecho que su diámetro: a 50 micras de la tobera el flujo se concentra en un pincel de ~200 micras de ancho, ensanchándose progresivamente aguas abajo hasta convertirse en el conocido patrón de zona de silencio rodeada por ondas de choque. Este resultado sorprendente permitirá simulaciones gasdinámicas más precisas del campo de flujo cercano en expansiones supersónicas.

Por otra parte, estimulado por nuestro reciente trabajo sobre medidas de microgotas de agua subenfriadas en vacío (Phys. Rev. Lett. **120**(1), 015501 (2018)), hemos realizado pruebas de medidas de temperatura de trenes de gotas micrométricas en aire mediante espectroscopía Raman. Los primeros resultados apuntan a que sí es posible medir la temperatura de las gotas en esas condiciones, aunque se necesita mejorar la estabilidad del tren de gotas para conseguir una mayor precisión. Este trabajo es una colaboración con el Área de Aerodinámica Experimental del INTA (S. Sor Mendi).

En cuanto al desarrollo instrumental, se ha diseñado y fabricado una primera tobera de alta temperatura, con el fin de estudiar la relajación vibracional de especies como CO₂, proceso de gran importancia en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte. En este primer montaje el calentamiento se produce mediante resistencias eléctricas, y en las primeras pruebas se ha conseguido calentar la tobera hasta 650 C. El bloque portatobera va aislado de su soporte mediante un espaciador refrigerado por agua, para evitar posibles daños a los microposicionadores y demás componentes sensibles de la cámara de expansiones.

En el apartado de desarrollo metodológico, hemos comprobado que la reformulación de la ecuación de Boltzmann generalizada, en su nueva forma reducida, es mucho más potente y sencilla de manejar, interpretar y programar, que la ecuación maestra convencional. Conduce de forma sencilla, elegante, y rigurosa a la ecuación de relajación, dejando muy claro cuál es su rango y condiciones de aplicabilidad. Esto ha permitido interpretar por primera vez en términos de colisiones moleculares el cambio de régimen subsónico a supersónico de forma unificada, demostrando que las singularidades sistemáticamente comentadas en la literatura son artefactos matemáticos sin una realidad física subyacente. Por otra parte, se ha logrado obtener una aproximación analítica para la ecuación cinética que proporciona excelentes resultados en el campo de flujo posterior al primer diámetro de tobera, con significación estadística $R > 0.999$ para un conjunto de 32 datos experimentales independientes en el rango térmico de 100 a 20 K.

Por último, en colaboración con el Departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M. L. Senent) y con la Universidad de Huelva (M. Carvajal), se ha completado el análisis de los espectros Raman torsionales de dimetil-éter (DME) natural y del isotópomo con ¹³C, registrados en nuestro laboratorio. La región de los sobretonos torsionales del DME es muy compleja por el acoplamiento con el modo de flexión C-O-C y la abundancia de bandas calientes, pero es de gran interés astrofísico para poder detectar estas moléculas en el medio interestelar. El espectro del DME enfriado en chorros supersónicos ha permitido asignar sin ambigüedad el modo torsional desconocido hasta la fecha, los sobretonos torsionales y sus primeras bandas calientes, rectificando de paso la asignación errónea de la literatura.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

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

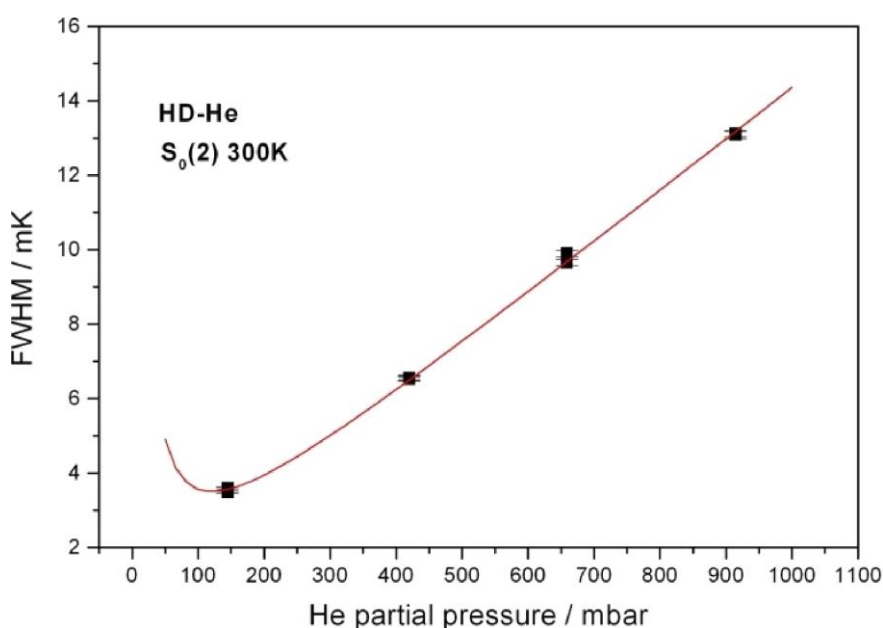
La principal línea de trabajo en el Laboratorio de Espectroscopía Láser a lo largo del año 2018 ha consistido en el estudio, por espectroscopía Raman de alta resolución, del sistema colisional constituido por la molécula de hidrógeno monodeuterada (HD) y el átomo de helio, sistema al que nos referiremos de forma abreviada como HD-He.

Esta línea de trabajo constituye una continuación de la ya iniciada en el año 2017 con el estudio del sistema colisional D₂-He. Merece la pena destacar que el interés fundamental de estos sistemas colisionales reside en su relativa simplicidad: el constar únicamente de un isotópologo de la molécula más ligera y del átomo inerte más ligero existentes convierte al sistema H₂ (D₂, HD)-He en un patrón (*benchmark*) para el estudio de colisiones. Debido a la mencionada simplicidad, el coste computacional de los cálculos y simulaciones en estos sistemas se ve considerablemente reducido y esto permite la realización de avances más rápidos en los refinamientos, normalmente iterativos, que se introducen mediante la

comparación de los resultados de simulaciones vs. experimentos tanto en los métodos de cálculo como en las superficies de energía potencial que describen las interacciones. A la vista de los buenos resultados obtenidos en el sistema D_2 -He, que permitieron la determinación de valores experimentales para los coeficientes de ensanchamiento y desplazamiento colisional de las líneas del espectro Raman de rotación de la molécula de D_2 y su comparación con los resultados computacionales, dando lugar a dos publicaciones en el *Journal of Raman Spectroscopy*, se decidió extender el estudio al isotópologo HD de la molécula de hidrógeno.

Al igual que en el caso del D_2 , los experimentos se llevaron a cabo utilizando la técnica de espectroscopía Raman estimulada (SRS) para obtener espectros Raman de alta resolución de las tres primeras líneas rotacionales, $S(0)$, $S(1)$ y $S(2)$, del espectro del HD. La configuración experimental habitual se modificó para poder alcanzar las frecuencias relativamente bajas de estas primeras líneas rotacionales mediante la utilización de dos láseres de colorante y el uso de polarizaciones cruzadas en la célula de muestra, lo cual a su vez facilitó la separación de los haces de bombeo y prueba a la salida de la célula. El estudio se realizó a tres temperaturas (77, 195 y 300 K). Para cada una de las tres líneas espectrales, y a cada temperatura, se realizaron series de medidas con presiones parciales fijas de HD (entre 1 y 5 mbar dependiendo de las condiciones) y diferentes presiones parciales de la especie perturbadora He, típicamente entre 50 y 900 mbar. Esto permitió monitorizar la variación en la anchura y frecuencia de las líneas espectrales en función de la presión de helio.

El análisis de los perfiles de línea experimentales se realizó mediante ajustes con perfiles de Voigt, que dan cuenta de la convolución de la función de aparato (gaussiana), la anchura Doppler (gaussiana) y la anchura colisional (lorentziana). Esto permitió la extracción de las contribuciones colisionales a las anchuras, las cuales a su vez se utilizaron para obtener, mediante el ajuste con modelos apropiados (lineales en los casos más simples, o modelos con dependencias más complejas en aquellos casos en que se observaba estrechamiento de Dicke), valores para los coeficientes de ensanchamiento colisional (γ). La figura adjunta muestra un ejemplo de uno de estos ajustes a un modelo no lineal.



Determinación del coeficiente de ensanchamiento de $S(2)$ a 300 K mediante un ajuste no lineal

Los coeficientes de desplazamiento colisional (δ) se obtuvieron de manera similar a partir del análisis de las frecuencias de las líneas espectrales y su variación con las presiones parciales de He.

En el momento de redactar esta memoria se encuentra en marcha el proceso de comparación de nuestros resultados experimentales con los provenientes de los cálculos realizados por expertos de otros grupos internacionales.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA

Modelización atómica y caracterización experimental de fases secundarias formadas en condiciones del almacenamiento del combustible nuclear gastado

Por medio del acuerdo de colaboración que había suscrito entre el IEM y el CIEMAT para la “Caracterización experimental y teórica de fases secundarias y óxidos de uranio”, se ha venido desarrollando una labor investigadora por parte de ambas instituciones en óxidos de uranio tales como la schoepita, metaschoepita, bequerelita y urafonana. En la Unidad de Residuos Radiactivos de Alta Actividad (URRAA) del CIEMAT se ha descrito la estructura cristalográfica de estos minerales y se han registrado sus espectros infrarrojo y Raman. En el IEM-CSIC se ha llevado a cabo la simulación atómica de sólidos periódicos basadas en la teoría del funcional de la densidad (DFT) en el contexto de ondas planas y pseudopotenciales de los mismos, con el objetivo de la obtención de difractogramas de Rayos-X, como asimismo la obtención de espectros Infrarrojo y Raman, que han sido comparados con los obtenidos experimentalmente. E incluso en la parte de simulación se ha ido algo más lejos con la descripción de las propiedades mecánicas de estas fases minerales.

Control cuántico de alineamiento y orientación en moléculas aisladas y gases dipolares ultrafríos

El teorema de no clonación de la mecánica cuántica establece que un estado cuántico arbitrario y desconocido no puede ser copiado. El descubrimiento de este teorema, de gran importancia para el desarrollo de la Teoría de Información Cuántica, se atribuye a Wootters, Zurek y Dieks, que en 1982 publicaron sendos artículos de forma independiente. Sin embargo, Park había publicado en 1970 una demostración completa, que ha pasado desapercibida hasta ahora. Hemos presentado en una publicación un análisis del contexto histórico que llevó a las formulaciones más conocidas del teorema y especulado sobre las causas que llevaron a ignorar la demostración de Park.

2A.4. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros, mezclas y nanocompuestos de matriz polimérica.
- Física de polímeros: movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Biofísica.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanocompuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Nano y microestructuración de superficies poliméricas.
- Electrónica orgánica.
- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.
- Fenómenos de precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Sistemas poliméricos reciclables: morfología, estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en poliolefinas y mezclas.
- Microscopía electrónica de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica de proteínas y complejos macromoleculares biológicos.

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, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrreología.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecano-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.
- Microscopía de fuerzas atómicas (AFM).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).

- Espectroscopía de absorción de rayos X (NEXAFS).
- Dispersión resonante de rayos X blandos (RSOXS).
- Impresión a chorro de polímeros.

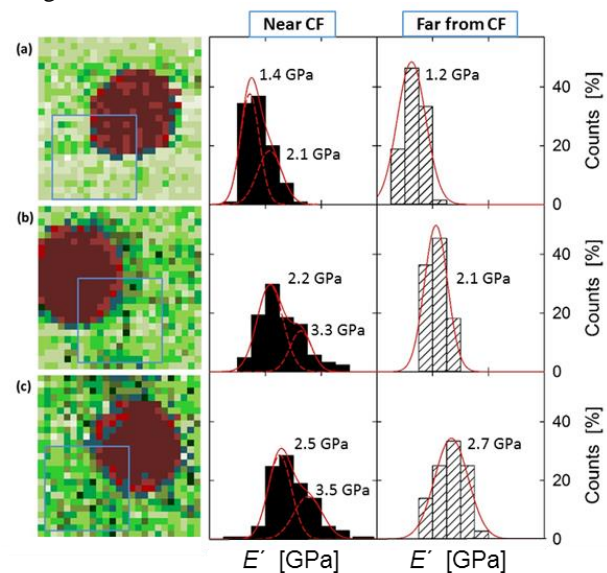
LABOR INVESTIGADORA

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

MAPEADO DE LAS REGIONES DE TRANSICIÓN PRÓXIMAS A LAS FIBRAS DE CARBONO EN COMPUESTOS MULTIESCALARES DE POLIPROPILENO Y GRAFENO MEDIANTE NANOINDENTACIÓN

Se han investigado nuevos aspectos sobre el papel que puede jugar la incorporación de distintas proporciones y tipos de grafeno (G) en las propiedades de materiales compuestos multiescalares. Existe una demanda progresiva de materiales ligeros, de larga duración y al mismo tiempo muy resistentes, para sectores como el del transporte. Por esta razón, los componentes de base polimérica van siendo progresivamente substituidos por materiales compuestos que incorporan todo tipo de refuerzos. El grafeno es un candidato idóneo debido a sus excelentes propiedades intrínsecas, que pueden aportar una mejora substancial de la conductividad eléctrica y térmica, de las propiedades de barrera, de la estabilidad térmica y, desde luego, de las propiedades mecánicas de un gran número de matrices poliméricas. En este trabajo, y mediante indentación instrumentada, se han estudiado las propiedades mecánicas locales de sistemas multilaminares reforzados jerárquicamente. Estos laminados están constituidos por una alternancia de capas de polipropileno isotáctico (iPP), que incorporan distintas proporciones y tipos de grafeno, con capas de tejido de fibras de carbono (CFs). El objetivo es llegar a entender la influencia del grafeno en las propiedades de los materiales a la nanoescala, e incluso su extrapolación a escalas mayores, no solo desde el punto de vista mecánico, sino también considerando su conductividad eléctrica. Se ha comparado la distribución de datos mecánicos, obtenidos alrededor de una CF aislada en la frontera entre láminas adyacentes, con una distribución equivalente lejos de cualquier fibra. Las distribuciones asimétricas de valores del módulo de almacenamiento E' en regiones cerca de una CF muestran la presencia de un hombro a valores altos de E' , que precisan de dos funciones gaussianas para ajustar cada perfil. La que está centrada a módulos menores coincide muy bien con la distribucional unimodal obtenida en regiones alejadas de cualquier CF, por lo que debe representar las propiedades intrínsecas de las capas poliméricas. Además, la segunda gaussiana debe estar asociada a las propiedades de la región de transición polímero/fibra. En el caso del iPP puro, fila (a) en la figura, la

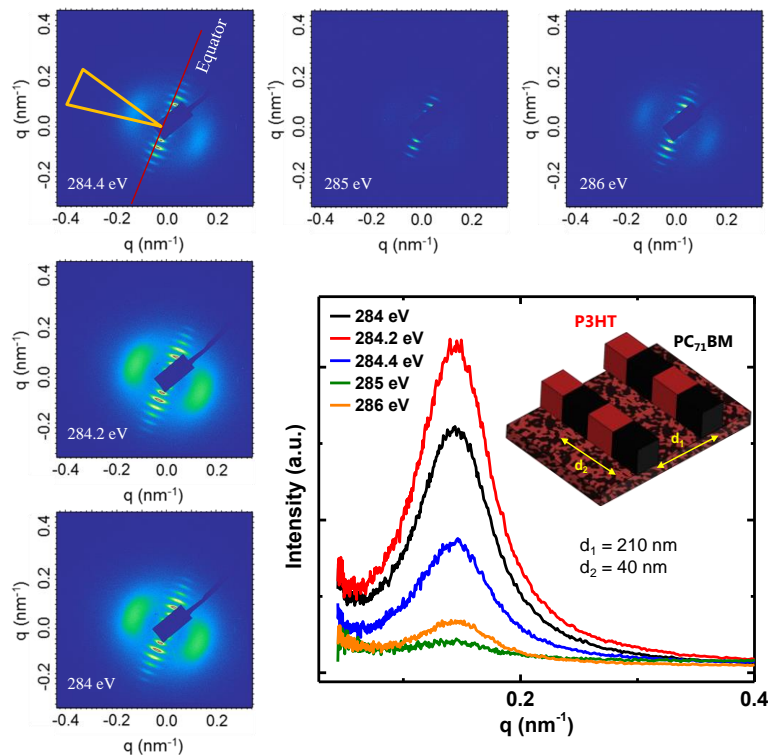
distribución a valores altos de E' se puede identificar con una interfase de tamaño micrométrico bien diferenciada con respecto a las propiedades de la matriz. El aumento en la presencia de grafeno, 0.9% vol (fila b) y 1.6% vol (fila c), da como resultado que todas las distribuciones de E' , incluyendo los hombros a valores altos de E' , se desplacen progresivamente hacia valores mayores. Se ha comprobado mediante medidas de SEM, que las laminillas de grafeno tienden a acumularse en el frente de fibras debido a un efecto barrera producido por las CFs, dando lugar a una región de transición, superpuesta a la interfase, con un incremento en sus propiedades. Por otra parte, se ha podido constatar que la modificación química del grafeno con cadenas cortas de polipropileno (PP) no repercute positivamente en las propiedades elásticas, pero sí aumenta significativamente la resistencia de las CFs aisladas en condiciones de cizalla. Esta mejora puede atribuirse a la interacción de las cadenas cortas de PP con las cadenas de la matriz que darían lugar a un cierto número de entrecruzamientos físicos. El trabajo discute la interrelación entre la distribución de nanorrefuerzo en la lámina polimérica, las propiedades mecánicas de cada componente de los laminados (especialmente de las interfases), y la conductividad a lo largo y a través del sistema laminar, en función del tipo y cantidad de grafeno.



Columna izquierda: Mapas de valores de E' obtenidos en regiones de $12.5 \times 12.5 \mu\text{m}^2$, conteniendo una CF, a partir de un conjunto de 25×25 huellas de 50 nm de profundidad. Centro: Distribución de datos de E' , cerca de una CF, dentro de los cuadrados azules señalados a la izquierda. Derecha: Distribución similar lejos de cualquier fibra. (a) iPP+CFs; (b) 0.9 vol % G/iPP+CFs; (c) 1.6 vol % G/iPP+CFs.

Grupo de DINÁMICA Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA (SOFTMATPOL)**INVESTIGACIÓN DE LA ESTRUCTURACIÓN JERARQUIZADA DE HETEROUNIONES ORGÁNICAS**

Con la colaboración del Dr. Cheng Wang del Advanced Light Source del Lawrence Berkeley National Laboratory, hemos demostrado que la técnica de dispersión de rayos-X resonante en el borde del Carbono permite evaluar la separación de fase entre el donante y el aceptor producida en los canales de superficies nanoestructuradas por láser de la heterounión orgánica P3HT/PCBM. Haciendo uso de la polarización de rayos-X blandos es posible diferenciar entre la separación de fase entre los dos componentes inducida por el láser y adicionalmente una organización direccionada a lo largo de los canales de ambas fases.

**EFEECTO DE LA ARQUITECTURA MOLECULAR EN LA OBTENCIÓN DE ENSAMBLADOS QUIRALES ESTABLES**

En colaboración con el grupo del Prof. Luis Oriol de la Universidad de Zaragoza, se ha estudiado el ensamblado de una serie de copolímeros de bloque sensibles a la luz que pueden mostrar quiralidad cuando se iluminan con luz polarizada. La quiralidad a diferentes niveles jerárquicos juega un papel fundamental en la vida, confiriendo funcionalidades únicas a los sistemas biológicos. La posibilidad de acceder a nuevas estructuras ordenadas jerárquicamente, imitando a la naturaleza, mediante el control de la quiralidad a nivel molecular y supramolecular ha despertado un gran interés en campos como la síntesis asimétrica, la detección quiral, las memorias quirales o la óptica no lineal, entre otros. Los polímeros estudiados son sintetizados mediante polimerización por radicales de transferencia atómica (ATRP) de metacrilato de propargilo y metacrilato de metilo y posterior modificación de los grupos laterales con azidas del ácido 2,2-bis (hidroximetil) propanoico decorado con dos motivos, dos azobencenos o uno azobenceno y un bifenilo. De esta manera se consiguen moléculas con fotorespuesta. Para polímeros con bajo contenido en el bloque fotosensible, se puede fotoinducir quiralidad, iluminando con luz polarizada circularmente. Se ha estudiado su estructura mediante difracción de rayos X.

EFEECTO DEL CONFINAMIENTO EN LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES DE MOLECULAS ORGÁNICAS PEQUEÑAS SEMICONDUCTORAS

Muchos dispositivos optoelectrónicos orgánicos, como los diodos emisores de luz, los transistores de efecto de campo y las células fotovoltaicas, utilizan una capa activa ultrafina en la que el semiconductor orgánico está confinado en dimensiones de tamaño nanométrico. El efecto de esta restricción espacial afecta las propiedades del material no suele ser estudiado sistemáticamente, a pesar de poder influir drásticamente en su estructura y por tanto en su rendimiento final. En colaboración con el Dr. Jaime Martín, de la Universidad del País Vasco, se ha estudiado

el efecto del confinamiento en una molécula pequeña semiconductor, el p - DTS (FBTTh2). Se ha observado que, el confinamiento espacial puede ser una herramienta eficiente para controlar la orientación del cristal y la textura general de las estructuras de p-DTS (FBTTh2) de manera controlada, lo que permite la manipulación de propiedades, incluidas las características de fotoluminiscencia y transporte de carga. La información obtenida a partir de los diagramas de temperatura / confinamiento establecidos mediante la calorimetría diferencial de barrido diferencial y difracción de rayos X de incidencia rasante han permitido identificar rutas de procesamiento específicas que pueden extrapolarse directamente a otros materiales orgánicos funcionales, como semiconductores poliméricos, ferroeléctricos.

MATERIALES POLIMÉRICOS BASADOS EN: A) PTT y PTT-PTMO CON DIFERENTES NANOADITIVOS Y B) RECURSOS BIOLÓGICOS

Se han preparado nanocompuestos poliméricos basados en poli(trimetilén tereftalato) (PTT) y sus copolímeros con poli(óxido de tetrametileno) (PTT-PTMO) con diferentes nanoaditivos como: polisilsesquioxanos (POSS), nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT) funcionalizados y grafito expandido. Asimismo, se han determinado sus propiedades físicas, mecánicas, reológicas, térmicas y eléctricas. Paralelamente, se están llevando a cabo estudios en materiales con elevado potencial biodegradable como son los poliésteres aromáticos basados en el ácido 2,5-furano-dicarboxílico y poliésteres alifáticos obtenidos a partir del ácido 1,4-ciclohexano-dicarboxílico y en otro tipo, pertenecientes al grupo de los conocidos como elastómeros termoplásticos, constituido por copolímeros en bloque de poli(butilén tereftalato) y poliácido láctico.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES

PREDICCIÓN DE PROPIEDADES DE POLIETILENO MEDIANTE SIMULACIÓN

Hemos repasado varios aspectos del enfoque computacional en el estudio del fundido de polietileno y propiedades del estado sólido en relación con los resultados experimentales existentes. En 40 años de experiencia en el campo, hemos ofrecido una visión personal de cómo las simulaciones por ordenador están ayudando a entender la física de polietileno como un polímero modelo. El primer tema discutido fue el estado fundido de polietileno, incluyendo características del enmarañamiento junto con su impacto en el comportamiento reológico y propiedades estáticas y dinámicas. Luego examinamos la transición del cristal, el proceso de cristalización y estructura de estado sólido, incluyendo la región interlamelar. Por último, se dio una descripción breve de los últimos avances en simulación de propiedades mecánicas y de las diferentes metodologías que se utilizan para simular la física de polietileno.

PROPIEDADES HIDRODINÁMICAS Y ELECTROFORÉTICAS DEL COMPLEJO FORMADO POR ERBB2 Y EL ANTICUERPO MONOCLONAL TRASTUZUMAB

En colaboración con el Servicio de Oncología del Hospital Ramón y Cajal se han estudiado las propiedades en disolución acuosa de los complejos formados por el dominio extracelular del receptor transmembranal ERBB2 y el anticuerpo monoclonal Trastuzumab. La sobreexpresión del receptor ERBB2 en células cancerosas está asociada a un pronóstico pobre principalmente en cáncer de mama metastásico. El anticuerpo monoclonal Trastuzumab es una herramienta terapéutica muy eficaz en el tratamiento de dicho tipo de cánceres. Por ello es de enorme interés conocer en profundidad el mecanismo de interacción de dicho complejo proteico. Por ello se ha desarrollado un estudio experimental y computacional sobre las propiedades hidrodinámicas y electroforéticas de dicho complejo en disolución acuosa, medio natural en el que se produce la mencionada interacción. Los resultados obtenidos muestran la presencia tanto de complejos 1:1 como 2:1 para la asociación ERBB2:Trastuzumab indicando la gran afinidad entre ambos. También es destacable la gran flexibilidad del conjunto y la correlación entre propiedades electrostáticas y movilidad macroscópica de los mismos.

COMPLEJOS QUIRALES DE TITANIO (IV) QUE CONTIENEN LIGANDOS POLYDENTADOS BASADOS EN α -PINENO. ACTIVIDAD CATALÍTICA EN SULFOXIDACION CON PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

La reacción de $TiCl_{4-n}(OiPr)_n$ ($n = 0, 2, 4$) con varios ligandos terpenoides basados en α -pineno producen estereoselectivamente una serie de nuevos complejos quirales de Ti(IV). Dichos complejos pueden ser octaédricos, $[TiCl_2X(OC_7H_6Me_3NCH_2CH_2G-\kappa^3N,N,O)]$ ($X = Cl, G = NH_2, 1; X = OiPr, G = NH_2, 2; G = NHMe, 3$) o bipirámide trigonal, $[Ti(OiPr)_3(OC_7H_6Me_3NCH_2CH_2G-\kappa^2N,O)]$ ($G = NH_2, 4; NHMe, 5$) y $[TiX(OiPr)(OC_7H_6Me_3NCH_2CH_2O-\kappa^3N,O,O^*)]$ ($X = Cl, 6; OiPr, 8$), dependiendo de la acidez de titanio, las condiciones de reacción y la naturaleza del grupo final del ligando terpenoide. Cálculos de teoría del funcional de la densidad (DFT) se han llevado a cabo para evaluar la estabilidad de los múltiples diastereoisómeros posibles lo que nos permite proponer nuevas sugerencias

estructurales. Los nuevos complejos de titanio eficazmente catalizan la oxidación selectiva de varios tipos de sulfuros a sulfóxidos o Sulfonas utilizando peróxido de hidrógeno acuoso, en condiciones suaves.

EFFECTO DE LA COLONIZACIÓN DE LÍQUENES EN TEJAS CERÁMICAS Y PROCEDIMIENTO COMBINADO DE ELIMINACIÓN MEDIANTE ACCIÓN DE LÁSER Y BIOCIDA

La colonización biológica de las tejas cerámicas por líquenes es un fenómeno común. Este estudio revela los resultados de un procedimiento combinado realizado para evaluar la eliminación de líquenes en diferentes tipos de tejas cerámicas no esmaltadas mediante tratamientos basados en la irradiación con láser y el tratamiento con biocida de CF de Acticide (R). La composición química y mineralógica de las tejas se caracterizó por espectrometría de fluorescencia de rayos X (XRF), microscopía petrográfica óptica polarizada y difracción de rayos X (XRD). La irradiación con láser se realizó mediante la aplicación de secuencias de pulsos de láser de nanosegundos en dos longitudes de onda (1064 y 266 nm). Después de la irradiación láser, se aplicó un biocida. Para evaluar el efecto combinado de ambos tratamientos, se utilizaron varias técnicas, que incluyen microscopía óptica y de fluorescencia (FM), microscopías electrónicas de barrido (SEM) y transmisión (TEM), y espectroscopia FT-Raman. La composición química de las tejas analizadas se mostró como un factor relevante en relación con el grado de interacción entre la colonización biológica y el sustrato y, por lo tanto, en el efecto de biodeteriorante. El procedimiento combinado ha demostrado ser muy efectivo en la eliminación de las capas corticales en todas las especies de líquenes y en producir daño en ambos biontes.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1. THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Loop Quantum Cosmology.
- Quantum Field Theory in Curved Spacetimes.
- Nonlocal gravity.
- Multiscale spacetimes.
- Gravitational waves (LISA Consortium).
- Field theory and geometry.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear Structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric molecules.
- Van der Waals interaction in ZIFs.
- Photodissociation of organic readicals.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Geometric Hamiltonian formalism.
- Quantum field theory in curved spacetimes.
- Combinatorics.
- Computational methods.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
- Highly correlated ab initio calculations.

RESEARCH ACTIVITY

GRAVITATION AND COSMOLOGY

Loop Quantum Cosmology (LQC) has recently been applied to extend the analysis of primordial perturbations to the Planck era and discuss the possible effects of quantum geometry on the cosmic microwave background. Two approaches to LQC with admissible ultraviolet behavior leading to predictions that are compatible with observations are the hybrid approach, proposed by our Group at the IEM, and the dressed metric approach, proposed by Ashtekar and collaborators. In spite of their similarities and relations, in 2018 we have shown that the effective equations that these approaches provide for the evolution of the tensor and scalar primordial perturbations are somewhat different. When backreaction is neglected, the discrepancy appears only in the time-dependent mass of the corresponding field equations. We have explained how this difference arises from the distinct quantization procedures. Besides, given the privileged role that the big bounce plays in LQC, e.g. as a natural instant of time to set initial conditions for the perturbations, we have analyzed the positivity of the time-dependent mass when this bounce occurs. We have proven that the mass of the tensor perturbations is positive in the hybrid approach when the kinetic contribution to the energy

density of the inflaton dominates over its potential, as well as for a considerably large sector of backgrounds around that situation, while this mass is always nonpositive in the dressed metric approach. Similar results are also valid for the scalar perturbations.

We have also analyzed the passage to a continuum limit of Fourier modes for the primordial perturbations around flat cosmological spacetimes in LQC. We have shown that this limit can be reached even if one starts by considering a finite fiducial cell as spatial slice. We have focused our attention on regimes in which the background geometry follows the so-called effective dynamics of LQC, although our arguments can be extended beyond this regime and to other formalisms in Cosmology. Whereas the perturbed system can be described in an invariant way under changes of the fiducial volume using suitable variables, we have shown that the desired continuum limit can be established by means of scaling transformations of the physical volume when this volume grows unboundedly. These transformations lead to a model with a continuum of modes and independent of any scale of reference for the physical volume.

In addition, we have investigated the role played by the vacuum of the primordial fluctuations in hybrid LQC. We have considered scenarios where the inflaton potential is a mass term and the unperturbed quantum geometry is governed by the effective dynamics of LQC. In this situation, the phenomenologically interesting solutions have a preinflationary regime where the kinetic energy of the inflaton dominates over the potential. For these kinds of solutions, we have shown that the primordial power spectra depend strongly on the choice of vacuum. We have studied in detail the case of adiabatic states of low order and the non-oscillating vacuum introduced in our Group, all imposed at the bounce. The adiabatic spectra are typically suppressed at large scales, and display rapid oscillations with an increase of power at intermediate scales. In the non-oscillating vacuum, there is power suppression for large scales, but the rapid oscillations are absent. We have argued that the oscillations are due to the imposition of initial adiabatic conditions in the region of kinetic dominance, and that they would also be present in General Relativity. Besides, we have discussed the sensitivity of our results to changes of the initial time and other data of the model.

Finally, we have discussed the freedom available in hybrid LQC to define canonical variables for the matter content and investigated whether this can be used to derive a quantum field theory with good properties for the matter sector. More specifically, we have focused our study on the case of fermionic perturbations of Dirac type around a cosmological spacetime. In particular, we have analyzed the possibility of obtaining a finite fermionic backreaction, as well as a Hamiltonian that is densely defined in Fock space while dictating the Schrödinger dynamics associated with the evolution of the creation and annihilation variables of the fermionic perturbations.

Nonlocal Quantum Gravity is renormalizable and unitary field theory of gravity that features operators with infinitely many derivatives. This year has been marked by three achievements obtained by our group (one of the most active on this theory at the international level). First, we solved the Cauchy problem and showed that the dynamics requires a finite number of initial conditions in the metric, thus extending for the first time similar results of 2007 for a scalar field. In parallel, we could count the number of nonperturbative degrees of freedom of the theory, also finite. These results allow us to give physical meaning to classical dynamical solutions. Third, we showed that all Ricci-flat metrics are stable solutions of the theory. This implies that also Schwarzschild is a solution and the theory admits singular black holes, contrary to the general idea that nonlocality is sufficient to resolve the singularities of general relativity. Presently we are checking whether these solutions are physical.

With respect to multiscale spacetimes, generated in quantum gravities, we capitalized on our major advances in 2017 to begin the most fundamental phase of the theory, namely, the construction of the so called dynamics with fractional derivatives. A preliminary study on the mathematical properties of these operators highlighted the necessity to revise some of the initial ideas, which will ripe in 2019. In parallel, we placed the strongest observational constraints to date (coming from precision tests of the Standard Model electroweak interactions) for the models already developed.

Last, one of the group members entered the LISA Consortium, in the Cosmology Working Group and the Fundamental Physics Working Group. LISA is an ESA/NASA space interferometer to come to operation in 2034, which will detect gravitational waves of high-redshift astrophysical objects, such as supermassive black holes and rapid binary systems. Despite the fact that we are still far away from getting access of LISA data, there is an intense activity to complete the so-called Phase A of the experiment, where both the details of the instrument design and the science we will be able to do with them will be finalized. In the theoretical Working Groups, we are exploring the possibility of placing observational constraints on modified gravity models and on quantum gravity. Two ongoing projects will be completed in the first months of 2019 and there are no publications for 2018. However, we should highlight the growing, at the national and international level, of the relationships between our group and others working in the Consortium, including in the above mentioned multiauthor projects. This activity was accompanied by a growing of expertise on the subject that can play an important role in future research at the IEM.

As an application of combinatorial methods to the study of relevant problems in quantum gravity we have employed a number of ideas developed for the study of compound linear quantum systems to the solution of some long standing problems in Loop Quantum Gravity (LQG), in particular the precise determination of the spectrum of geometric operators, such as the area, relevant for the study of black holes in LQG. By relying on a generalization of the standard generating functions derived through the use of Laplace and Mellin transforms, we have been able to find both the asymptotic behavior of the density of eigenvalues of the area operator in the large area limit and also a very accurate representation for this quantity for low areas. In the process we have been able to drive hitherto unknown identities involving Bernoulli numbers (a welcome side result of the combinatorial and number analytic methods that we have used).

Another interesting development, this time within the realm of quantum field theory in curved spacetimes, has been the introduction of an efficient method to extend adiabatic regularization and renormalization techniques to the treatment of Dirac fields. The crucial idea in this regard was finding a way to write the evolution equation for the functions of time describing the Fourier modes of the Dirac field as a time dependent Schrödinger equation for a two by two matrix Hamiltonian. From this we managed to find a perturbation scheme to its solution compatible with the adiabatic approximation. The solution was built by an iterative procedure and written as a product of unitary operators. The symmetry properties of the solution thus obtained made it easy to understand some features of the known results about this problem. Specifically, we have been able to use this new approach to recover known results about the conformal and trace anomalies of several models of cosmological interest (involving Yukawa couplings and electromagnetic fields).

We have proposed and studied in detail a proposal for a method of direct measurement of the two-point function in quantum fields. With the objective of further understanding intense gravitational fields, we have performed an analysis of the ergoregion instability of a rotating quantum system, reaching the conclusion that there exist metastability regions in parameter space. We have also devised a method for dealing with nonlocalities (possibly coming from quantum effects in effective theories) in field theory by means of the introduction of an additional degree of freedom related to the scale of the system. The cosmological constant problem has also been addressed from the point of view of special relativistic field theory of gravity arguing that, perhaps this is not a problem at all.

CONDENSED MATTER THEORY

Variational reduced density matrix theory for strongly correlated systems

The study of strongly correlated many-body systems require the use of special theoretical tools that should go beyond the scope of mean field theories. Methods that are more refined have been developed along the years, each one with its particular limitations. Let us mention among them some of the most successful, like the density matrix renormalizations group (DMRG) (limited to low dimensions and short range interactions), the Quantum Monte Carlo methods (limited by the sign problem) and several variational approximations combined with symmetry projection. One of these variational approaches, the variational reduced density matrix (VRDM) seems to be a promising approach to deal with strongly correlated systems at a low computational cost. We have recently applied it with great success to attractive pairing models by implementing a code of semidefinite programming. Unexpectedly, it turned out that the VRDM including condition of positivity for the 2-reduced density matrix is enough to reproduce exactly the ground state of integrable pairing models. As an extension of this work, we have implemented the complete set of positivity conditions for the three particle reduced density matrix within the semidefinite program. Applications to several molecules and repulsive pairing models show an important improvement over the previous VRDM framework without a significant increase in the computational cost.

Quantum thermodynamics

The non-equilibrium dynamics of quantum many-body systems is one of the most fascinating problems in physics. Open questions range from how they relax to equilibrium to how to extract useful work from them. A critical point lies in assessing whether a system has conserved quantities (or ‘charges’), as these can drastically influence its dynamics. We have proposed a general protocol to reveal the existence of charges based on a set of exact relations between out-of-equilibrium fluctuations and equilibrium properties of a quantum system. We apply these generalized quantum fluctuation relations to a driven quantum simulator, demonstrating their relevance to obtain unbiased temperature estimates from non-equilibrium measurements. Our findings will help guide research on the interplay of quantum and thermal fluctuations in quantum simulation, in studying the transition from integrability to chaos and in the design of new quantum devices and machines.

Study of the Haldane model with interactions

It is of fundamental interest in the topological matter community to understand the role between interactions in a system and the survival of its topological properties. To address this question we have studied a model of interest in the field, the Haldane model, whose topological properties are well known. We have studied this model by making two spinful copies to which we have added an on-site interaction between different spins that could be easily implemented in an ultracold atom setup. By introducing a novel mean-field ansatz and by using the Matrix Product State formalism we characterized the topology of the system in the presence of interactions. We also made a proposal to study this system in an ultracold atom setup. Our work and the novel mean-field ansatz that we introduced will help in the characterization of topological phases in interacting systems, opening the door to the study of systems with relevant size.

Superconductivity in twisted bilayer graphene

We have also investigated the theoretical basis of the superconductivity observed in twisted bilayer graphene by the group of Pablo Jarillo at MIT. This has been one of the most outstanding discoveries carried out during the last years in the context of condensed matter physics, and it has certainly attracted much attention as the first instance in which a material made purely of carbon has proven to be superconducting, in the absence of any chemical doping. Moreover, this discovery represents a change of paradigm when looking for materials with unconventional superconductivity, as chemical complexity is replaced here by the structural complexity of the twisted bilayers, which become superconducting near the so-called magic twist angle, when the period of the resulting moiré superlattice is above 10 nanometers.

At present, the mechanism responsible of the superconductivity in twisted bilayer graphene is unclear, and two different kinds of proposals have emerged, relying on either the electron-phonon or the electron-electron interaction. In this regard, we have put forward a comprehensive microscopic theory which places the origin of the superconductivity in the highly anisotropic Fermi line developed by the twisted bilayers at the small twist angles where they become superconducting. Our theoretical construction can be considered as a variant of the so-called Kohn-Luttinger mechanism, which was devised as an alternative route to superconductivity starting from a purely repulsive Coulomb interaction. Usually, the Kohn-Luttinger instability takes place at extremely low energy scales but, in twisted bilayer graphene, it is amplified by the doubling and subsequent strong coupling of the van Hove singularities of the electronic spectrum as the magic angle is approached, leading to quite extended saddle points in the highest valence band. In these circumstances, we have found that the highly anisotropic screening along the Fermi line is able to induce an attractive channel in the effective electron-electron interaction. This is the seed required to trigger a superconducting instability, which takes place in our model at a low-energy scale which is consistent with the critical temperatures observed in the experiments. Moreover, we have also shown that the large density of electron-hole excitations from the given Fermi line is able to develop a spin-density-wave instability adjacent to the superconducting instability, for doping levels close to the van Hove singularity in the spectrum. This may also explain the existence of the insulating phase observed at half-filling of the moiré superlattice, which seems to play the role of parent phase for the superconducting regime, and it is the other key ingredient in the puzzling resemblance of the phase diagram of the twisted bilayers to that of such strongly correlated systems as the high- T_c superconductors.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Beta-decay properties of neutron-rich nuclei

The study of beta-decay properties in various nuclear mass regions is of great interest not only from the nuclear structure point of view, but also because of the numerous applications in Nuclear Astrophysics. During the last year we studied systematically neutron-rich calcium, titanium, and chromium isotopes, characterized by ground states that may be deformed. The main interest of the study of the decay properties in this mass region is related to the structural changes expected in the isotopic evolution, as well as to the role that these decays may have in our understanding of the astrophysical Urca processes. These processes are involved in the cooling mechanism acting on white dwarfs and neutron stars, which is caused by the neutrino and antineutrino emission generated by cycles of electron captures and beta-decays, respectively. Our theoretical model is a proton-neutron QRPA approach based on a self-consistent Hartree-Fock deformed 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 the various isotopes and their equilibrium shapes are obtained from their energy-deformation curves.

We have determined beta-decay half-lives, beta-delayed neutron emission probabilities and energy distributions of the Gamow-Teller strength. The results have been compared with the available experimental information and with other calculations using different methods. In general, a reasonable agreement with experiment is obtained. These calculations are timely because they address a mass region which is at the borderline of present experimental capabilities at MSU (USA) and Riken (Japan).

Nuclei as three-body systems with mean field interactions

An important aspect of the work recently developed has been the implementation of a new method that permits to construct the interaction between clusters from a standard mean field calculation. More precisely, the idea has been to take into account the structure of the core in order to build a mean field interaction, which the one felt by the halo nucleons. In this way, few- and many-body degrees of freedom are combined in a new computationally efficient model applicable to both bound and continuum states and adaptable to different subfields of physics. We formulate a self-consistent three-body model for a core nucleus surrounded by two valence nucleons, where the core is treated in the mean-field approximation and the same effective Skyrme interaction is used between both core and valence nucleons. We apply the model to ^{26}O , where we reproduce the known experimental data as well as phenomenological models with more parameters. The decay of the ground state is found to proceed directly into the continuum without effect of the virtual sequential decay through the well-reproduced $d_{3/2}$ resonance of ^{25}O . We have also investigated two-proton radiative capture reactions by means of the ^{68}Se nucleus, investigating, in particular, the capture mechanism of the process. We have observed that, when possible, the sequential mechanism is preferred to the direct capture reaction. Finally, the ^{70}Ca nucleus has been used to investigate the appearance of halo structures when the neutron dripline is progressively approached. In the same work we have studied under what conditions nuclear excited states can be considered as Efimov states.

Efimov states

It is well-known that the behavior of the Efimov states strongly depend on the masses of the three constituents and on how much those constituents are confined in the space. As an example, in two dimensions the Efimov states are not present, whereas in three dimensions, the case where two of the constituents are much heavier than the third one is particularly convenient, since the Efimov states are, energy wise, much closer to each other.

In this context, we have systematically studied the behavior of the Efimov states for three bosons with unequal masses, investigating how the energy separation and the size of the states depend on the relative masses of the constituents. This analysis has been made in the general case of a space with non-integer dimension. Also, for the case of two-heavy and one-light constituents, how have shown how the presence of the Efimov states gives rise to a very particular behavior of the cross sections for atom-dimer collisions. In particular, the minima in the cross section scale similarly to the energy scale in the Efimov states.

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

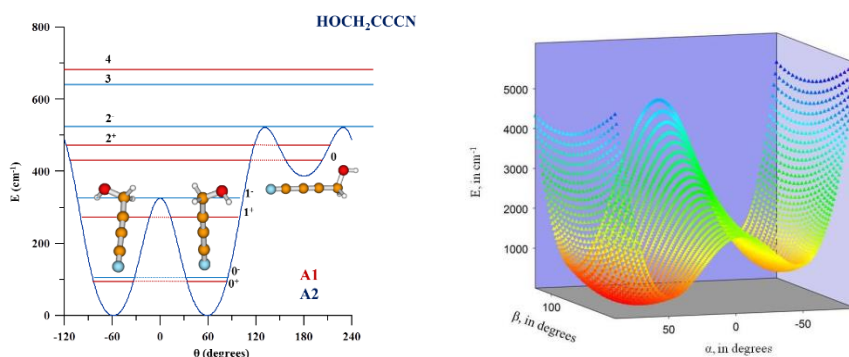
The research group employs highly correlated ab initio methods to characterize molecular species and chemical processes of astrophysical interest, to describe new materials with application to CO_2 capture and storage, and to determine Rydberg and dissociative electronic states of organic radicals.

During the year 2018, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within 2 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. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres. During the last years, our research focuses on organic cyanides.

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 2018, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C_3H and C_5H in collaboration with researchers from the University USTHB de Algeria. In collaboration with the Laboratory of Astrophysics of the Rennes Institute

of Physics we explored anions of small carbon chains. 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. Detailed attention was given to the isomers of the insaturated radical C_3H and C_5H . Neutral and charged forms have been studied given a special attention to the anions for their astronomical relevance.

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. During 2018, especial attention was given to organic species that present intramolecular hydrogen bonds, like as ethylen-glycol. In collaboration with the MW laboratory of the University of Lille we have studied several organic cyanides such as $NC-CCC-CH_2OH$. Attention has been given to methylamine.



Last studies within the frame of the Marie Curie FP7-CAPZEO concerning the interaction of CO_2 and water with imidazoles, have been published. 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. During 2018, we emphasized on the problem of the competition between CO_2 and other greenhouse effect gases (NF_6 , CH_4) for their capture in ZIF's

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

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Nuclear Structure studied at intermediate energies.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.

RESEARCH SUBLINES:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY

In 2017 the group has started a research project in collaboration with Dr. María Pilar de Lara-Castells and collaborators focused on the multiscale study from first principles of systems and processes of interest in nanoscience. It is a natural continuation of lines of research carried out in the group in the recent years. In this regard, the group's research is relevant in social areas such as energy, catalysis, novel materials and the science industry with an emphasis on the reduction of the environmental impact.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

Molecular hydrogen (H_2) is probably the most obvious current candidate to replace fossil fuels as an environmentally neutral energy vector. The safe and efficient storage of H_2 presents, however, a series of technological challenges not yet solved. One of the possible solutions is the adsorption of H_2 at low temperatures in sufficiently light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (that of liquid air) and about 50 atmospheres of maximum pressure. This imposes particularly problematic thermodynamic conditions since, above 33 K, molecular hydrogen is supercritical, that is, it is impossible to condense it whatever the pressure. Only by extreme confinement comparable to the molecular size itself, can this thermodynamic restriction be overcome. During 2018 we completed an experimental study on the one-dimensional crystallization of molecular deuterium under such extreme confinement within carbon nanotubes with very promising results.

The recent development of stable clusters of a few metallic atoms (atom-clusters) has opened up a plethora of potential applications. During 2018 we have demonstrated at the theoretical level (by means of advanced "Ab initio" calculations), how the implantation of silver atom-clusters on surfaces of titanium oxide changes its photonic response making it sensitive to natural light

GLASSY PHENOMENOLOGY IN CRYSTALS WITH MINIMUM DEGREE OF DISORDER

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

DEVELOPMENT OF ADVANCED INSTRUMENTATION FOR NEUTRONE SOURCES

At present, the research efforts in this line focus on the neutron source European Spallation Source, currently in the initial phase of construction. In 2018, radiation damage studies have been completed in the elements of neutron generation of the target as well as in structural parts, which has allowed to estimate the time of life in operation of the target.

ENSAR2- PASPAG APPLICATION TO THE SIMULTANEOUS DETECTION OF PARTICLE AND GAMMA RADIATION

(O. Tengblad, Irene Marroquin, Miguel García Castaño, E. Nácher, A. Perea)

Within the PASPAG collaboration we exploit novel scintillator materials and explore new techniques and concepts such as phoswich detectors and segmented or hybrid scintillators in order to develop the capability to simultaneously detect high-energy gamma rays, neutrons and charged particles. The emphasis is on a modular approach both in the scintillator crystals and photosensors as well as in the electronics where improved throughput and effective data processing will allow for compact scalable devices.

We try to take this technology out of basic science so that it can be exploited for societal applications within, for example, the areas of nuclear medicine and homeland security. Depending on the applications, features like energy resolution, position sensitivity, high rate capability, and insensitivity to magnetic fields or radiation hardness are of differing importance.

PASPAG is organised into different tasks, strongly connected with each other that range from the identification and characterisation of new materials (TASK 1) to the construction of small-size phoswich prototypes (TASK 2) and hybrid detectors (TASK 3), to be used in applications.

This year we have concentrated our work to TASK3. TASK3 Hybrid arrays and their applications: within this part of the project we do R&D on hybrid detector arrays. By hybrid arrays, we mean highly-segmented assemblies of different scintillator materials, and also the combined use of photosensors on the same detector package, for example, position sensitivity achieved with SiPMs on one side and a PMT on the other to obtain the best energy or timing resolution. This strand will also address societal applications outside fundamental research. Such applications span a broad range from medical imaging to homeland security. The PASPAG collaboration is working towards societal applications, especially in the case of nuclear security where we are aiming for a lightweight compact detector device that can be carried by an unmanned vehicle (remote-controlled) for measurements in areas of high radiation. We have in the laboratory of IEM been working on an accurate small sized ($2 \times 5 \times 10$ cm³) computer with incorporated geo-location and timestamping systems for wireless communication to a base station. Further, we are coupling this device to a novel scintillator materials with γ -n identification that are insensitive to humidity, magnetic field are emerging, coupled with light-weight low-powered sensors like SiPM.

ELECTRON CAPTURE OF ^8B INTO THE HIGHLY EXCITED STATES OF ^8Be

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

The experiment IS633 aims to study the 2^+ doublet at 16.6 and 16.9 MeV excitation energy in ^8Be populated in the β decay and electron capture (EC) of ^8B . In addition, we are interested on the so far unobserved EC-delayed proton emission from a state at 17.6 MeV. Assuming a factorization of ^8B wave function into $^7\text{Be}+p$, an upper limit of the branching ratio to this state decaying into $^7\text{Li}+p$ is estimated to be $2.3 \cdot 10^{-8}$.

The experiment was divided into two parts. The first part was focused on the 2^+ doublet (explained on last year memory) and the second part of the experiment was dedicated to determine the branching ratio to the 17.6 MeV state fed in EC and followed by delayed proton emission. The difficulty of this second part is two fold: the extremely low branching ratio and the low energy of the emitted proton, around 337 keV. In the following we discuss this second part of the experiment. The beam was produced from a target made of pellets of multi walled carbon nanotubes and send as a molecule to avoid the aggressive reactions of ^8B with other materials inside the target. The $^8\text{BF}_2$ beam was implanted in a carbon foil ($20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) inside of our chamber at the end of beamline LA1. The setup, shown in Fig. 1, was optimised to ensure as background free spectrum as possible in the region from 200 to 400 keV. The setup was composed by a thin ΔE detector of $30 \mu\text{m}$ with negligible β -response. Opposite to it, a Si Pad covering 3 times the solid angle of the ΔE to assure 100% coincidence coverage. Behind the ΔE , a Si VETO with a large β -response.

By the use of anti-coincidence, the background on the region of interest is reduced by a factor of 10^3 . Fig. 2 shows the raw spectrum in blue overlaid with the anticoincidence spectrum in red of the ΔE detector. Clearly the α and β response are largely removed but a better algorithm to clean the spectrum in the region of interest is needed. So far we can only set an experimental upper limit for the branching to this state of $4.4 \cdot 10^{-6}$.

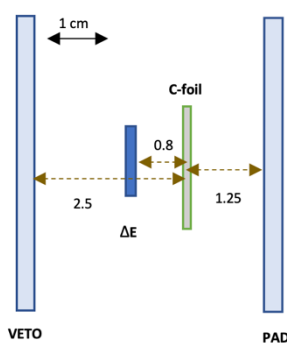


Fig.1: Setup of the experiment IS633

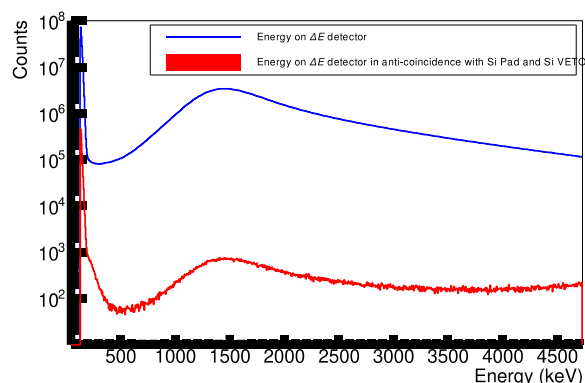


Fig.2: In blue, all the raw statistics for detector ΔE . In red, the result once the anti-coincidence with PAD and VETO is applied.

NEAR COULOMB BARRIER SCATTERING OF ^{15}C WITH HEAVY TARGETS AT HIE-ISOLDE, CERN. (J. D. Ovejás, I. Martel, O. Tengblad, M. J. G. Borge et al.)

High energy scattering studies (100 MeV/u) have previously suggested a halo structure for the weakly bound isotope ^{15}C . The collision process at those energies is sensitive to the single-particle structure of the ground-state wave function and the presence of a neutron halo would produce, as it was observed, a narrow momentum distribution for fragments following one-neutron breakup and a large value of the total interaction cross section, in comparison to its neighbouring isotopes $^{14,16}\text{C}$. However, around the Coulomb barrier (~ 5 MeV/u), the dynamics of the system would be dominated by collective degrees of freedom, and it would be characterized by the coupling between the elastic, transfer and breakup, as well as the effects of the continuum. The halo structure should therefore manifest in collisions with heavy targets by a strong absorption pattern in the differential cross section and the suppression of the nuclear rainbow.

Aiming to probe this debated structure, the first dynamical study of ^{15}C at energies around the Coulomb barrier was carried out in August 2017 at HIE-ISOLDE, CERN. For this purpose, a $^{15}\text{C}^{5+}$ ($A/Q=3$) beam was produced, purified and post-accelerated up to 4.37 AMeV and made to impinge on a 208Pb target. The measurement of the scattered ions following the reaction was performed with the GLORIA detector array. It consists of 6 silicon telescopes conformed by two DSSDs; a 40 μm thick front stage and a second 1mm thick stage. The detectors were placed surrounding the reaction target, covering scattering angles from 15° to 165° in lab. System with geometric efficiency of 25%.

Analysis is ongoing, to determine the differential elastic cross section. Detector pixels are grouped within averaged scattering angles and, by plotting the two-dimensional telescope figures, different ions and reaction channels can be separated and properly integrated.

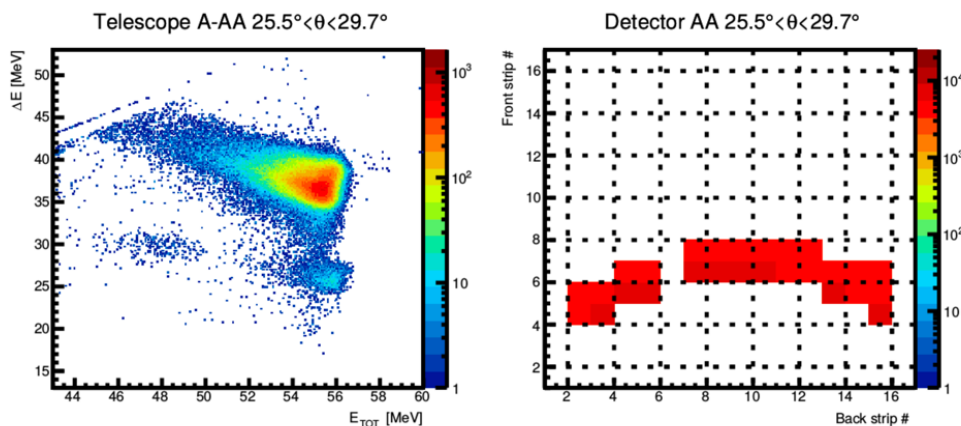


Figure 1. Two-dimensional plot (left) obtained from a set of pixels (right) within the same angular interval from a GLORIA telescope. The two observable regions correspond to the elastic scattering of ^{15}N and ^{15}C (both present in the experiment beam).

NP1306-RIBF98R1 EXPERIMENT: IN-BEAM GAMMA-RAY SPECTROSCOPY OF NUCLEI NEAR THE DOUBLY-MAGIC ^{132}Sn @ RIKEN

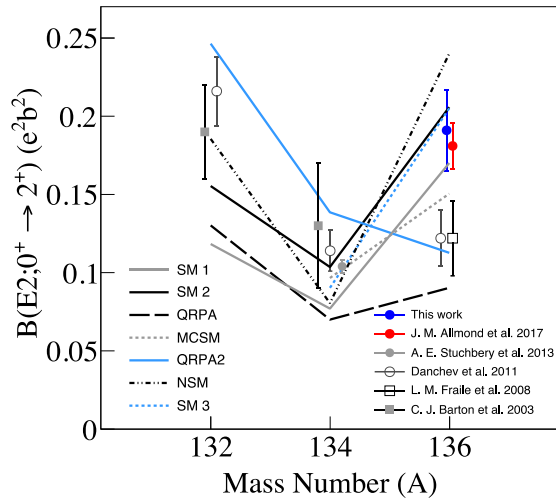
(FPA2014-57196-C5-4-P, PhD student FPI2015 Víctor Vaquero, Andrea Jungclaus)

Throughout the year 2018, we have finished the analysis and interpretation of the data taken in April of 2015 from an in-beam experiment conducted at the RIKEN Nishina Center (Japan). This has led to two new publications:

- **V. Vaquero, A. Jungclaus, et al., *Phys. Rev. C*, 99:034306, 2019** – Article in which we have studied the Coulomb excitation of ^{136}Te with the goal of determining the reduced transition probability $B(E2)$ of the first excited state 2^+ . Furthermore, we have performed a model analysis of the shape of the differential cross section and studied the excitation and decay properties of a hypothetical mixed-symmetry 2^+ state. In the figure, we show our experimental $B(E2)$ value together with the rest of experimental and theoretical $B(E2)$ values.

- **V. Vaquero, A. Jungclaus, et al., *Submitted to Physics Letters B in February 2019***- Article in which we have studied a wide systematics of one and multi-nucleon removal cross sections. The experimental cross sections are compared to predictions from different reaction models.

These two articles, together with the first results of this work published in the prestigious journal Physical Review Letters (V. Vaquero, A Jungclaus, et al. *Phys. Rev. Lett.* 118, 202502 (2017)), are part of the Victor's thesis “**In-beam gamma-ray spectroscopy of nuclei near doubly-magic ^{132}Sn** ” defended on 16th of November 2018 at the Faculty of Science (Autónoma University of Madrid).

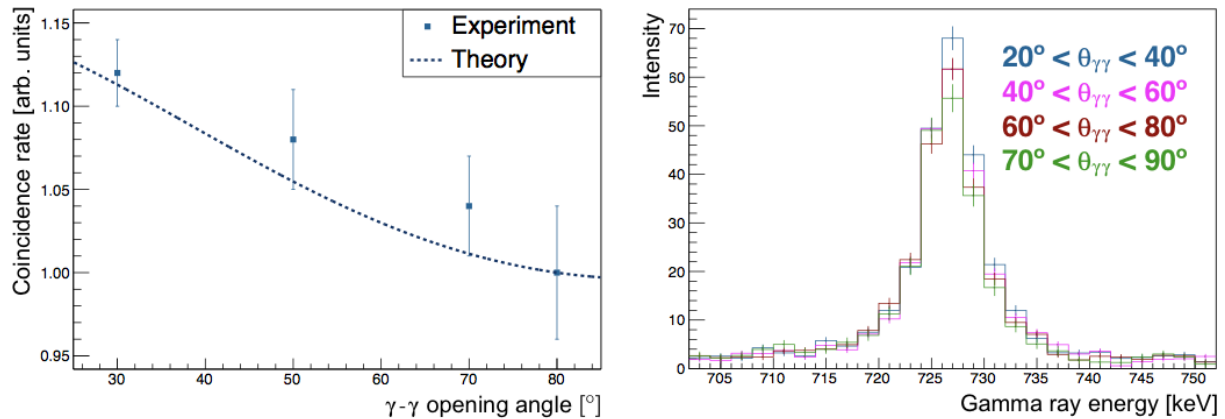


Experimental $B(E2)$ values for the $^{132,134,136}\text{Te}$ isotopes from our group (blue point) and previous values from the literature compared to different theoretical calculations

EXPERIMENT E693: EXPLORATION OF A-CLUSTER STRUCTURES IN ^{212}Po WITH AGATA@GANIL (PhD student Álvaro Fernández, Andrea Junglaus)

Recent gamma spectroscopy of ^{212}Po suggested that not only its alpha decay properties come out from strong alpha clustering correlations between its valence nucleons. These correlations are also deemed responsible for the enhanced electric dipole transition probabilities between some of its excited states. To better understand the nuclear structure properties of this nucleus, the experiment E693 was conducted at the accelerator complex of GANIL (Caen, France) in May 2017 aiming for the measurement of excited state lifetimes using the Doppler Shift Attenuation Method (DSAM). The experimental setup consisted of the gamma-ray tracking array AGATA plus a cylindrically symmetric Double-Sided Silicon Strip Detector (DSSSD) to detect the light reaction products. This setup was chosen to maximize the sensitivity of the DSAM technique to very short lifetimes.

In 2018 we have continued with the analysis of the data taken in this experiment. In this report we focus on the analysis of the gamma-gamma angular correlations, which is one of the aspects of the data analysis carried out so far. When an excited nuclear state decays to the ground state through two electromagnetic transitions involving the depopulation of an initial state and the population of a final state through an intermediate one, a correlation between the emission direction of the 2 gamma rays exists. The probability distribution governing the opening angle between the 2 emitted gamma rays in the cascade depends on both the spins of the initial and final states and the multipolarity of the transitions. This correlation thus provides a valuable tool for nuclear structure studies using gamma-ray spectroscopy, but the correlation is often smeared when using position-insensitive gamma-ray detectors and usually specific setups have to be used to exploit this technique. However, the unprecedented position resolution of the AGATA array together with the number of crystals composing the array at the time of the experiment enables the application of this technique to in-beam data using this position-sensitive detector. For this study, we have extended the proposed data analysis techniques for arrays involving a large number of crystals, and we show the preliminary results for the $4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$ cascade depopulating the first excited states in ^{212}Po . The obtained coincidence probability between the gamma rays in the cascade is 12(2) % higher at opening angles between 20° and 40° than in the range 70° to 90° , in good agreement with the value of 11% expected from theory. This technique can now be applied to confirm and revise previous spin assignments and transition multiplicities in the nucleus ^{212}Po .



Left: Coincidence rate obtained for the cascade $4^+ \rightarrow 2^+ \rightarrow 0^+$ in ^{212}Po versus the opening angle between the detected gamma rays, relative to the value between 70° and 90° . The dashed line represents the prediction from theory. **Right:** Illustration of the intensity of the $2^+ \rightarrow 0^+$ transition in coincidence with the line depopulating the first 4^+ excited state, for several opening angles between the two gamma rays.

OPTICAL PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR NANOWIRE METASURFACES

The interference between electric and magnetic dipolar fields is known to lead to asymmetric angular distributions of the scattered intensity from small high refractive index (HRI) particles. Properly designed all-dielectric metasurfaces based on HRI spheres have been shown to exhibit zero reflectivity, a generalized Brewster's effect, potentially for any angle, wavelength and polarization of choice. At normal incidence, the effect is related to the absence of backscattering from small dielectric spheres or disks at the, so-called, first Kerker condition. In contrast, homogeneous HRI cylinders do not fulfil the first Kerker condition due to the mismatch between the local electric and magnetic density of states. In this research line, we show that cylinder dipolar interaction leads to an anomalous Kerker condition, and in turn to a generalized Brewster's effect in a nanorod-based metasurface. We derive a coupled electric and magnetic dipole (CEMD) analytical formulation to describe the properties of a periodic array of HRI nanorods in full agreement with exact numerical calculations. Work developed in collaboration with the Donostia International Physics Center, supported by MICIU Excelencia Project LENSBEAM.

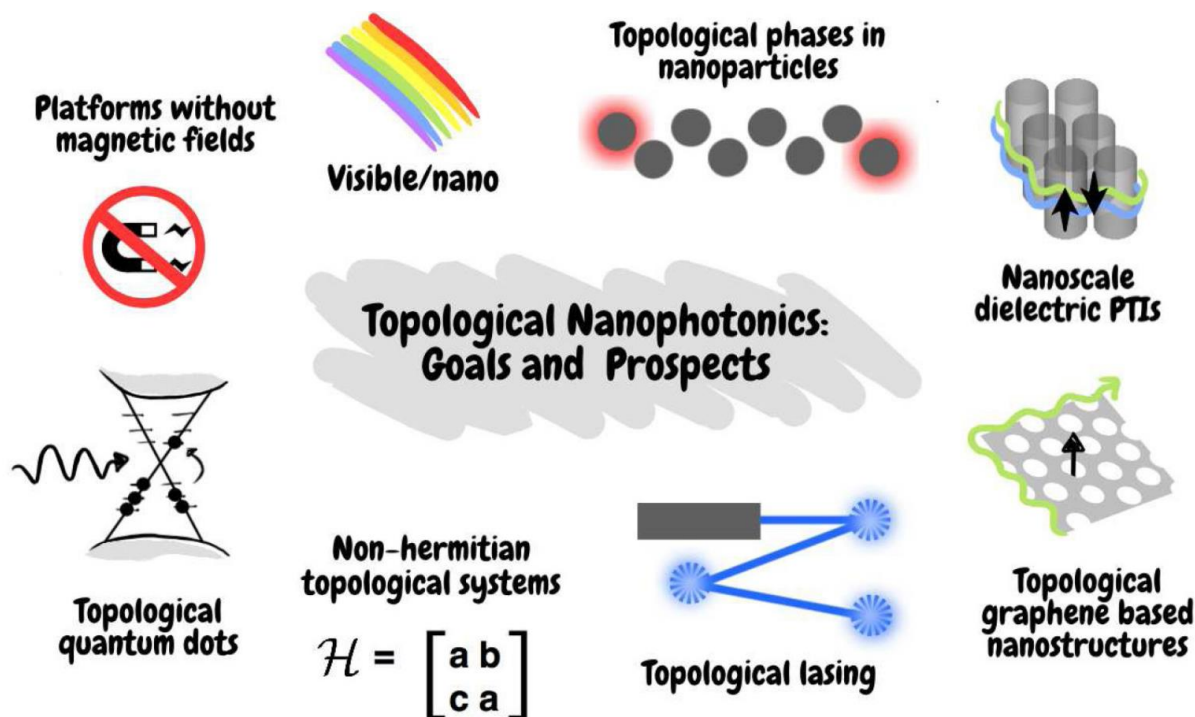
PLASMONICS: OPTICAL HEATING & DIAGNOSTICS

We have continued our research work on plasmonics, with special interest in the potential for optical heating and for non-invasive diagnosis of metallic nanoparticles with strong localized surface plasmon resonances. The tremendous impact that cardiovascular diseases have in modern society is motivating the research of novel imaging techniques that would make possible early diagnosis and, therefore, efficient treatments. Cardiovascular optical coherence tomography (CV-OCT) emerged as a result of such a demand, and it has already been used at the clinical level. Full utilization of CV-OCT requires the development of novel contrast molecular agents characterized by a large scattering efficiency in the infrared (800-1400 nm). Gold nanoparticles (GNPs) seem to be the best candidates, but their scattering properties in the infrared are hardly known. In most of the cases, scattering properties are extracted from numerical simulations. This research line aims at providing an experimental evaluation of the infrared scattering properties of different GNPs (nanoshells, nanostars, and nanorods), with remarkable extinction coefficients in the 1st and 2nd biological windows, including the particular CV-OCT wavelength. We use a unique combination of techniques (thermal loading experiments, infrared optical coherence tomography, infrared dark field microscopy, and optoacoustic spectroscopy) to experimentally determine the scattering efficiency at three different NIR wavelengths (808 nm, 980 nm, and 1280 nm), lying in the 1st and 2nd biological Windows, along with advanced numerical simulations. Work developed in a large collaboration where we provide the theoretical understanding of GNP optical properties, as supported by MICIU Excelencia Project LENSBEAM.

TOPOLOGICAL NANOFOTONICS

Topological photonic systems, with their ability to host states protected against disorder and perturbation, allow us to do with photons what topological insulators do with electrons. Topological photonics can refer to electronic systems coupled with light or purely photonic setups. By shrinking these systems to the nanoscale, we showed how can harness the enhanced sensitivity observed in nanoscale structures and combine this with the protection of the

topological photonic states, allowing us to design photonic local density of states and to push towards one of the ultimate goals of modern science: the precise control of photons at the nanoscale. This is paramount for both nanotechnological applications and fundamental research in light matter problems. For purely photonic systems, we work with bosonic rather than fermionic states, so the implementation of topology in these systems requires new paradigms. Trying to face these challenges is helping in the creation of the exciting new field of topological nanophotonics, with far-reaching applications.



NANOFABRICATION

The nanofabrication of nanostructures with advanced optical properties was one of the main objectives of our group during 2018. The interaction of appropriated light with plasmonic nanoparticles (NPs) leads to a high intensification of the local electric field, which is the basis for the molecular detection based on Raman and fluorescence. This is why during the past year we have developed methods of synthesis of nanoparticles with interesting applications both in spectroscopy and catalysis. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). 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 Surface-enhanced Raman scattering (SERS) and Surface-enhanced fluorescence (SEF), 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 also prepared.

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 2018. 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.

The functionalization experiments of NPs aliphatic and aromatic dithiols of different length was completed. 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 transmission electron microscopy (TEM). Functionalized NPs were successfully applied to the detection of organochlorine pesticides such as 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. Moreover, a similar study was carried out for aromatic dithiols using dithiols with different lengths (bearing one or two benzenic rings between both SH groups). The preliminary results seen with these compounds demonstrate that a polymerization of molecules occurs on the surface by the formation of disulfide bonds. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of the PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

POLLUTANT DETECTION

During the last year, we have carried out the application of the SERS technique in the detection of persistent pollutants that do not need any surface functionalization. These molecules are very important under the environmental point of view, since it is employed in agricultural practices in many countries of the world. Therefore, the detection of these compounds is an important issue to prevent human health risks. 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. In order to fulfill this goal, it was conducted a study of interaction of therapeutical peptides such as somatostatine, octhreotide, lanreotide and pasereotide with Ag and Au nanoparticles. This work was done to monitor the structural changes occurring in these peptides once adsorbed onto the surface.

During the last year, progress was done in the research line dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques due to their large luminescence. This was the case of the standard humic substances (soil, leonardite and lignite) adsorbed on NP of diferent morphology. Specifically, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin 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 study was extended to commercial humic substances named "standard", which are the ones usually employed in all laboratories. The above functionalization process leads 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).

We have progressed during the past year in the study and detection of the anti -inflammatory drugs ketorolac, indomethacin and piroxicam and emodin antitumor by SERS and SEF at trace concentrations. The interaction mechanisms with the surface were also determined.

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

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

On the other hand, the fabrication of silver nanoparticles by laser irradiation of a pure silver target in water was carried out. This work was done in collaboration with the Laser, Nanostructures and Materials Processing group of the Instituto de Química-Física Rocasolano. Several wavelengths of a Nd:YAG laser (1064, 532 and 266 nm) were employed. A 10 cm lens was used to focus the radiation onto the silver immersed in milliQ water. Two irradiation times (25 and 50 minutes) and two fluencies (3 and 6 times the silver ablation threshold) were used with each wavelength irradiation. Thus, 12 types of silver colloids were prepared. The prepared silver nanoparticles were characterized by UV-Vis spectroscopy and TEM microscopy. The study of the SERS effectiveness of the silver colloids was carried out using a synthetic dye as a probe molecule. Later, agar gels were prepared in order to use them to encapsulate the silver nanoparticles and avoid their flocculation. These SERS sensors were employed to detect the probe molecule and their SERS enhancement factors were calculated-

ARTIFICIAL MATERIALS OF HERITAGE: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION

Finally, the removal of lichens on roof tiles and dolomite stones by laser irradiation were carried out in collaboration with the Laser, Nanostructures and Materials Processing group of the Instituto de Química-Física Rocasolano. In particular, optic microscopy and Raman spectroscopy were employed to analyze physical and chemical modifications of the samples after laser irradiation at several wavelengths (266 and 1064 nm).

The calcium silicate hydrate (C-S-H) is the main component of the binders used in restoration since the 19th century and its properties depend on its nanostructure and its composition, the latter in terms of Ca / Si ratio. Starting from reagents of different nature and microstructure, the size of the hydrated calcium silicate nanoparticles formed has been determined, being smaller if the initial material is nano-sized, which also influences the morphology of the nanoparticles.

The possibility of synthesizing AgNPs supported in calcium silicate hydrate, synthesized following the previous methodology, is explored. The variables to be studied are the concentration of Ag, the temperature and the presence of aluminium in the hydrated calcium silicate. These compounds would be biocompatible and therefore their possible use as drug transport agents will be studied.

In collaboration with the IETCC, work is being done on the application of Micro-Raman and SERS to the study of the additive / cement paste interaction, which will allow deepening into the adsorption phenomena of the additives, variation of the formation kinetics and morphology of the reaction products.

Finally, in collaboration with the Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, a research line was started during the 2017 dealing with the study of a methodology of analysis of bones based on the application of the Raman technique.

2B.3. MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY

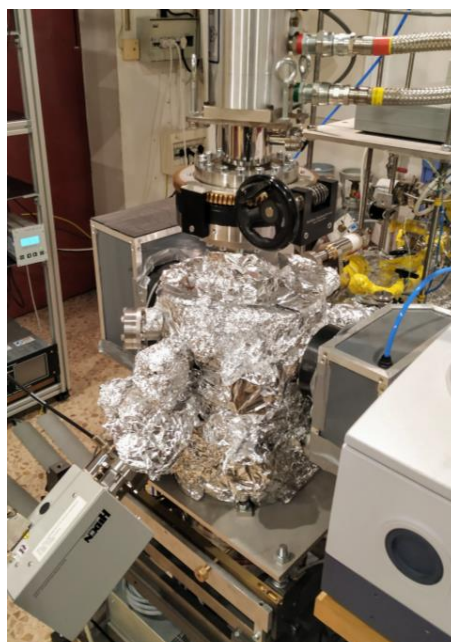
MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

Astrophysical ices

One of our sub-lines is devoted to the investigation of ices similar to those present in different astrophysical environments, like the surface of interstellar dust grains, the surface of cold Trans Neptunian objects, or in comets nuclei. Those ices contain mainly H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, and other minority neutral or ionic species. In particular, during 2018, we have concentrated in the study of water and light hydrocarbons like CH₄ and CH₃OH. At the IEM ice laboratory, we recorded NIR and MIR spectra of pure species and binary mixtures of H₂O and CH₄ at 30K, monitoring changes in peak position and band intensities in the mixture spectra with respect to the pure species spectra. Additionally, in collaboration with M. A. Satorre from the Universidad Politécnica de Alcoy, with whom we had a Coordinated Project funded by MINECO, we have been able to determine absolute band intensities and infrared optical constants of methanol ices grown between 20 K and 130 K. Crystalline and amorphous phases of solid methanol were obtained with different spectroscopic features and densities that vary between 0.6 g/cm³ and 0.8 g/cm³. The information obtained is relevant for the interpretation of astrophysical observations of these ices.

During 2018 we have performed text experiments in the ultra high vacuum chamber, where residual pressures of 10^{-10} mbar are obtained. We have performed preliminary experiments of thermal programmed desorption of CH_4 ices grown on Al or amorphous solid water surfaces. The next step is to use hydrogenated amorphous carbon surfaces, analogues to those of interstellar cosmic dust. From the theoretical viewpoint, we have investigated the formation of water molecules on a silicate surface. This study has been performed in collaboration with the group of Alber Rimola of the University Aut3noma de Barcelona, as a result of a three months stay of Germ3n Molpeceres.

The recent detection of methyl isocyanate (CH_3NCO) in astrophysical media has awakened the interest on this species. We have continued a joint investigation with J.C. Guillemin (Rennes, France), who has prepared and sent us samples of this molecule and its deuterated isotopologues, and J. Cernicharo (IFIC, CSIC). This led to the publication of a first article in 2017, and in 2018 a second paper has been published in which we describe the stability of the ice of this molecule under processing by different sources that mimic the conditions of cosmic rays.



We have continued on our collaboration with the Institute of Low Temperature Science (ILTS) of the University of Hokkaido at Sapporo, and in particular with the group of Profs. Naoki Watanabe and Akira Kouchi, funded by an i-link CSIC project. They have first class experimental equipment which has been used to study $\text{CO}/\text{H}_2\text{O}$ ice mixtures at various conditions. Our collaboration started initially with the prediction of the IR spectra of these mixtures, and the comparison with the observations. This work gave rise to two publications in 2016 and 2017, and in 2018 we have opened new subjects of collaboration on ices of irradiated amorphous water, surface effects on hydrogenated carbonaceous (HAC) samples, adsorption of methanol on ASW surfaces, and Al oxide nanoparticles. One of these lines has been published the past year, and all other are under progress.

Within the frame of a Unidad Asociada with the Department of Physical Chemistry of the Complutense University, we have been collaborating with Dr. Pedro C. G3mez on the theoretical calculation of different molecular systems for several years. In recent times, we are working on a new field, consisting in the prediction of spectra in the near-IR region of amorphous ices by means of Molecular Dynamics. In particular, our aim is to predict the spectra of solids made of H_2O and various small molecules, like CO_2 , CH_4 and others, such as are found to exist in the so-called Trans Neptunian Objects, including Pluto and Charon, for which new data are becoming available from the New Horizons mission. This line of work has opened up a new collaboration with Prof. Emilio Artacho, at the Cavendish Laboratory of Cambridge, UK, where R. Escribano has spent a 3-month sabbatical. We have now a manuscript ready to be submitted for publication.

Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance

With our colleagues from the Nanocosmos EU project, we have completed the full installation of a Molecular Astrophysics Lab at the Yebes Astronomy Observatory. This has covered several stages, from initial tests to check the viability of the technique, already published in 2018 on *Astronomy&Astrophysics*, to the performance of several tests that insure the correct operation of the equipment. The aim is to study the rotational emission of astrophysical gas-phase molecules in the millimeter wave region, using for this purpose detectors in the Q(31.5-50 GHz) and W(72-116 GHz) bands, with 38 kHz resolution. A reactor has been built where gases can be introduced at low pressure, and afterwards irradiated with UV lamps, or ionized or dissociated by inductively-coupled radiofrequency discharges that generate new chemical species. The laboratory is fully operative and we are in the process of preparing manuscripts for publication with our results.

In collaboration with F. J. Aoiz and J.E. Verdasco (U. Complutense, within our Unidad Asociada contract) and V. S3ez R3banos (UPM), we have continued on with the study of reactivity quantum dynamics for two prototype systems: $\text{O}(3\text{P})+\text{H}_2$ y $\text{F}+\text{HD}$ at very low temperature. In the former, we are searching for mechanistic changes in the proximity of the classical threshold revealed by the Λ -doubling of the OH product, whereas in the latter we investigate the presence of resonances in both exit isotopic paths.

We have followed up on the study of molecular ions of astrophysical interest. As an extension of the experiments done on the CH^+ ion, and in close collaboration with the University of Cologne (S. Schlemmer & O. Asvany), we have measured with extraordinary precision, and for the first time in the laboratory, vibration-rotation transitions of $^{12}\text{CH}^+$ and $^{13}\text{CH}^+$. For that purpose, we have used the technique of “Laser Induced Inhibition of Complex Growth”, using an infrared Optical Parametric Oscillator as excitation source. The ions are mass-selected and confined in a cryogenic ion trap at ~ 7 K. We have also measured the lowest frequency rotational transitions of the NH_3D^+ , NH_2D_2^+ y NHD_3^+ ammonium ion isotopologues, in this case using a frequency multiplication chain as radiation source. While for NH_3D^+ there were previous laboratory data, for the doubly and triply deuterated species these are the first direct laboratory measurements available. Since the ammonium ion is a highly relevant species in astrochemistry (as precursor of ammonia and other nitrogen-containing and possibly prebiotic molecules) identifying the other deuterated species in the ISM is of great interest. Furthermore, it will help to understand the high deuterium fractionation observed in cold molecular clouds (D/H ratios orders of magnitude larger than the cosmic ratio). In the difference frequency infrared spectroscopy laboratory, we have started the study of the PH^+ ion, which is also a very interesting species in the context of a possible prebiotic chemistry in space. In this case, the measurements in Cologne of the rotational transitions have not been successful, therefore our determinations of vibration-rotation transitions in hollow-cathode discharges will be of the utmost interest.

Generation, processing and study of interstellar dust analogs

We have continued on with the study of the formation of interstellar HAC analogs by means of radiofrequency inductive discharges of plasmas containing He/Ar and $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_2$ mixtures. HAC deposits were first monitored by using IR spectroscopy, and afterwards they were bombarded with 5 keV electrons, that mimic cosmic-ray irradiation. Our aim was to elucidate a discrepancy found in previous literature, as explained in the 2017 Memory. The clues are the descent of the $3.4 \mu\text{m}$ band and the growth of other bands related to the C=C stretch, as a function of the electron flow onto the sample. The observations indicate changes in the composition of the material, including loss of hydrogen. A publication with the PSST journal gathers our results, which deal with HAC density, and describe the use of techniques like Secondary Electron Microscopy (SEM) and visible-UV reflectance.

This field is enlarged with our new line based on the production and characterization of carbon nanoparticles of astrophysical interest, grown from Ar/He and C_2H_2 plasmas. For this purpose, we have developed and built a specifically-designed radio-frequency reactor with capacitance coupling. Nanoparticle formation is monitored by the scattering seen on the output signal of a laser, collected on a CCD device. The collected samples are then analyzed by using IR spectroscopy, whereas the plasmas were characterized by optical emission spectroscopy and mass spectrometry of ions and neutral particles.

Also as part of EU Nanocosmos Project, we have an ongoing investigation on the spectroscopic characterization of magnetron-generated plasmas at the Stardust machine, with the goal of generating dust nanoparticles of various compositions, formed by processes similar to those occurring at the interstellar medium, and to thoroughly study them. In particular, during 2018 we have recorded spectra of plasma generated on graphite targets, using Ar as filling gas, and also adding small concentrations of H_2 or C_2H_2 . The results are being processed and will be sent for publication soon...

Within the line of work of characterization of astrophysical systems of different types, we have also focused on the study of phyllosilicates, that is, expansive clays that can be found, not only on Earth but also on other bodies of the Solar System, such as Mars or the dwarf planet Ceres. We carry out both a theoretical study, based on the use of first principles methods, and experimental, with the synthesis of samples and their analysis based on IR spectroscopy. We are studying also the interaction of these clays with aminoacids, and the possible survival of the biological samples adsorbed at their surface, under extremal conditions of UV or thermal irradiation. The minerals most studied in 2018 were smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to $50 \mu\text{m}$ of quartz, feldespat, calcite, iron and aluminum oxides, silicon, gypsum and aragonite, keeping our collaboration with Dr. Ana María Fernández (CIEMAT).

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

During 2018 we have continued the quantitative study of out-of-equilibrium gas flows. Supersonic gas jets are an extraordinarily fertile medium, where the study of inelastic molecular collisions, the fundamental mechanism of energy transfer in gases, is feasible. The laboratory of Molecular Fluid Dynamics is equipped with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twenty-five years, whose performance and flexibility are unique worldwide.

A large fraction of this year's work has been devoted to the characterization of the near flow field to the nozzle, a region lacking accurate experimental data, where the flow undergoes the transition from the subsonic (confined

within the nozzle) regime to the supersonic expansion with its radial flow and shock waves. For that goal, new experiments on supersonic H₂ expansions were carried out through a 325 microns nozzle, from stagnation conditions of 280 mbar and 363 K, accurately mapping the region of the first nozzle diameter. In particular, number densities and rotational temperatures have been measured in 50 radial cuts of ~ 9 microns width, at 6 axial distances from 50 to 350 microns. These measurements have been completed with those of supersonic expansions of natural D₂ and ortho-D₂ and their mixtures with He carried out last year. From the analysis of all these measurements, we observed that, just outside the nozzle orifice, the supersonic flow is much narrower than its diameter: 50 microns downstream the nozzle the flow is confined to a plume ~ 200 microns wide, progressively broadening downstream to become the familiar pattern of a zone of silence surrounded by a structure of shock waves. This surprising result will allow more accurate gasdynamic simulations of the near-flow field in supersonic expansions.

On the other hand, stimulated by our recent work on supercooled water microdroplets in vacuum (Phys.Rev.Lett.**120** (1), 015501 (2018)), we have carried out some temperature measurements of micrometric water droplet trains in air using Raman spectroscopy. The first results suggest that it is possible to measure the temperature of the droplets under those conditions, although an improved the stability of the droplet train is needed to achieve the required accuracy. This work is a collaboration with the Area of Experimental Aerodynamics of INTA (S. Sor Mendi).

Regarding instrumental development, a first high temperature nozzle has been designed and manufactured, in order to study the vibrational relaxation of molecules such as CO₂, a very important process for the radiative transfer within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars. In this first design, the heating is produced by electrical resistances, reaching a nozzle temperature up to 650 C in the first tests. The nozzle block is isolated from its holder by means of a water-cooled spacer, to avoid possible damage to the micro-positioners and other sensitive components within the expansion chamber.

In the section of methodological development, we have checked that the reformulation of the generalized Boltzmann equation, in its new reduced form, is much more powerful, and easier to handle, to interpret and to write into computer code than the conventional master equation. Furthermore, the relaxation equation can be deduced in a simple, elegant, and rigorous way, stating clearly its range and conditions of applicability. With this new formulation, it was possible to interpret in a unified way the transition from subsonic to supersonic regime in gas flows, for the first time in terms of molecular collisions, showing that the singularities systematically pointed out in the literature are mathematical artifacts without any underlying physical reality. On the other hand, it has been possible to obtain an analytical approach for the kinetic equation, that yields excellent results for the flow field downstream the first nozzle diameter, with statistical significance $R > 0.999$ for a set of 32 independent experimental data in the thermal range of 100 to 20 K.

Finally, in collaboration with the Department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (ML Senent) and with the University of Huelva (M. Carvajal), we have completed the analysis of the torsional Raman spectra of natural dimethyl ether (DME) and of its ¹³C isotopomer, recorded in our laboratory. The region of the torsional overtones of the DME is very complex due to their coupling with the mode C-O-C bending and the presence of many hot bands, but it is of great astrophysical interest in order to detect these molecules in the interstellar medium. The spectrum of the DME cooled in supersonic jet allowed us to assign unambiguously the torsional fundamental unknown to date, the torsional overtones and their first hot bands, amending a wrong assignment in the literature.

LASER SPECTROSCOPY

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

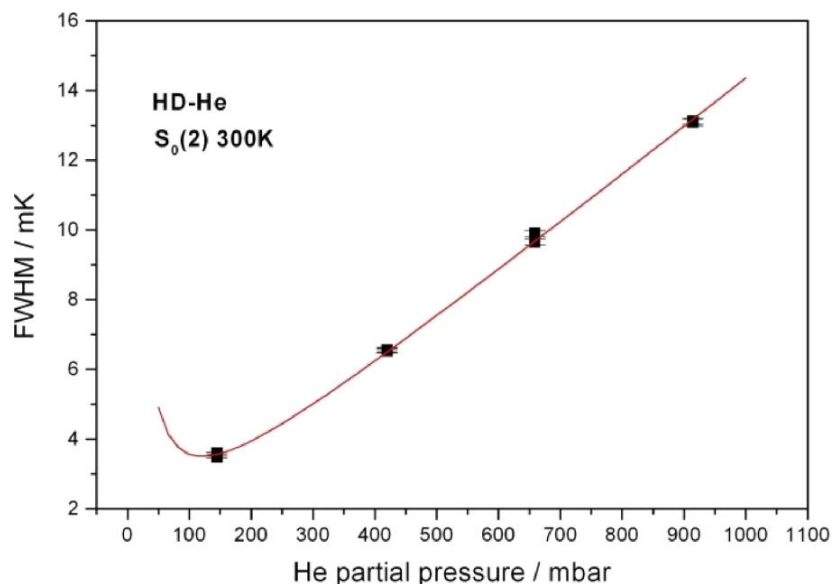
The main line of work in the Laser Spectroscopy Laboratory throughout the year 2018 has been the study, by means of high resolution Raman spectroscopy, of the collisional system formed by the molecule of monodeuterated Hydrogen (HD) and the helium atom, which we refer to as HD-He.

This line of work constitutes a continuation of the one already initiated in 2017 with the study of the D₂-He collisional system. It is worth highlighting that the main interest of these collisional systems stems from their relative simplicity: they consist of one isotopologue of the lightest stable molecule known (H₂) and one colliding atom which is also the lightest inert atomic species known (He). This makes them excellent benchmark systems for the study of collisions. Due to the aforementioned simplicity, the computational cost of calculations and simulations in these systems is quite manageable, which allows rapid progress in the refinement of both the calculation methods and the potential energy surfaces used to describe these systems, a process that is normally carried out iteratively by comparing the results of experiments vs. simulations. Our prior study of the D₂-He system allowed the determination of experimental values for the collisional broadening and shift coefficients of the rotational Raman lines of the spectrum of D₂ and a comparison with computational results, which in turn yielded two articles that have already been

published in *Journal of Raman Spectroscopy*. In view of these excellent results it was decided to extend the study to the HD isotopologue.

Like for D₂, the experiments were conducted using the technique of stimulated Raman spectroscopy (SRS) to obtain high resolution spectra of the first three rotational lines, $S(0)$, $S(1)$ and $S(2)$, in the Raman spectrum of HD. The usual experimental layout was modified to be able to reach the relatively low frequencies of these first rotational lines, which required the use of two dye lasers and crossed polarizations in the sample cell in order to facilitate the separation of the pump and probe beams after their interaction with the sample. The study was conducted at three different temperatures (77, 195 and 300 K). For each one of the three spectral lines, and at each temperature, several series of measurements were acquired with fixed partial pressures of HD (between 1 and 5 mbar depending on the conditions) and different partial pressures of the perturbing species He, typically between 50 and 900 mbar. This allowed us to monitor the variation of the widths and frequencies of the spectral lines as a function of He pressure.

The analysis of the experimental line profiles was carried out by means of numerical fits with Voigt profiles, which account for the convolution of the apparatus function (gaussian), Doppler width (gaussian) and collisional width (lorentzian). This allowed us the extraction of the collisional contributions to the total widths. These contributions were in turn analyzed and by means of fits with appropriate models (linear ones for the simplest cases, or models with more complex dependencies for those cases in which Dicke narrowing can be observed) and values for the collisional broadening coefficients (γ) were obtained. An example of one of these fits with a nonlinear model is shown in the attached figure.



Determination of the broadening coefficient for $S(2)$ at 300 K by means of a nonlinear fit.

The collisional shift coefficients (δ) were obtained in a similar manner analyzing the frequencies of the spectral lines and their variation with the partial pressures of He.

A thorough comparison between our experimental results and the results from calculations and simulations performed by international experts is underway.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS OF AND PLASMAS

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

Within the framework of a Joint Contract between IEM and CIEMAT dedicated to the “Experimental and Theoretical Characterization of secondary phases and uranium oxide”, we have carried out a joint research on uranium oxides such as schoepite, metaschoepite, beckerelite and urafonane. The crystal structure and IR and Raman spectra of these materials have been measured at the Unidad de Residuos Radiactivos de Alta Actividad (URRAA) of CIEMAT, and at IEM we have concentrated on the atomistic modelling of such periodic solids using DFT, plane wave basis sets and pseudo-potentials, which allows us estimating the theoretical counterpart of the magnitudes measured at CIEMAT. Furthermore, the theoretical treatment affords the calculation of mechanical properties of these materials.

Quantum Control of Alignment and Orientation in Isolated Molecules and Ultracold Dipolar Gases

The quantum no-cloning theorem establishes that an arbitrary unknown quantum state cannot be copied. This important theorem for the field of Quantum Information Theory, was apparently discovered in 1982 by Wootters and Zurek, and independently by Dieks. However, Park had published a complete and correct demonstration in 1970. We had presented in a publication an analysis of the historical context in which the better-known versions of the theorem were discovered. We have speculated about the reasons why Park’s demonstration was largely ignored.

2B.4. MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Multiscale simulation of polymeric materials and biological macromolecules.
- Physical properties and nanostructure of polymers, blends and polymer-based nanocomposites.
- Polymer Physics: Order and mobility in macromolecular systems.
- Application of the synchrotron light to the study of polymers and nanostructured materials.
- Biophysics.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

- 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.
- Structure development and properties of natural polymers and nanocomposites.
- Organic electronics.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incident (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Diferential 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, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and tetradetection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Simulations using high performance computing.
- Raman Spectroscopy.
- Neutron Scattering.

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

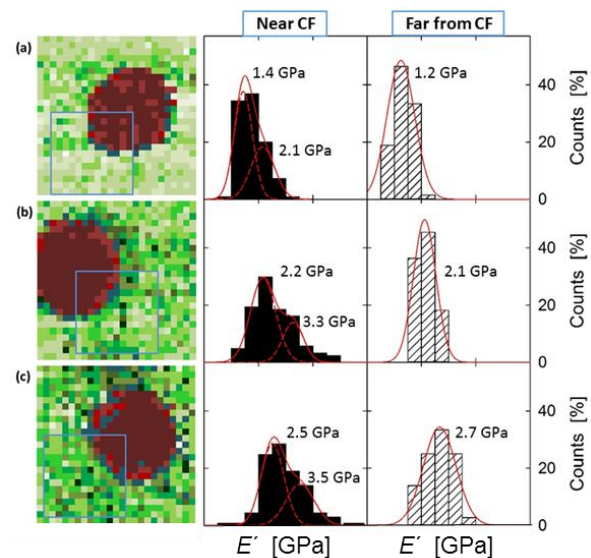
RESEARCH ACTIVITY

Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS

NANOINDENTATION MAPPING OF TRANSITION REGIONS CLOSE TO CARBON FIBRES IN MULTISCALE COMPOSITES OF GRAPHENE-REINFORCED POLYPROPYLENE

The work offers new aspects of a research in progress about the role of graphene (G) type and content on the properties of multiscale composite materials. The increasing demand for lightweight, long-lasting and resistant materials for transport facilities is pushing aside traditional polymer components to give way to polymer-based composites incorporating all types of fillers. Graphene is a most suitable candidate due to excellent intrinsic properties that can provide significant levels of electrical and thermal conductivities, better barrier properties, enhanced thermal stability and superior tensile properties to a number of polymer matrices. In this work, and by means of depth-sensing indentation, the local mechanical properties of hierarchically reinforced multilaminar systems have been studied. These laminates consist of layers of isotactic polypropylene (iPP), with different amounts and types of graphene, alternating with plies of carbon fibres (CFs) fabric. The aim is to understand the influence of graphene on the material properties at the nanoscale and even on the final material performance, not only from the point of view of mechanical properties, but also taking into account the electrical conductivity. The distribution of the mechanical data obtained around one isolated CF at the boundary with the polymer layer is compared with a similar analysis far away from any fibre. The asymmetric distributions of “Near CF” E' data show the presence of a shoulder at high E' values and demand for two Gaussian functions to fit each profile. The one centered at low moduli is in outstanding agreement with the unimodal distribution far away from any CF and hence, it should be related to the polymer-based layer properties. In addition, there is a second Gaussian

function at higher E' values that could be associated to the properties of the polymer/fibre transition region. In the case of neat iPP, row (a) in the figure, the high E' distribution can be identified with a micrometre-sized interphase showing distinct properties from those of the polymer matrix. With increasing amount of graphene, 0.9% vol (row b) and 1.6% vol (row c), the moduli distribution including the high E' shoulders progressively shift to higher values. SEM observations confirm that graphene platelets accumulate at the front of the ply due to the barrier effect, caused by the carbon fibres, giving rise to a transition region superimposed on the interphase with enhanced properties. On the other hand, it is noteworthy that the chemical modification of graphene by short polypropylene (PP) chains does not enhance the elastic properties, although it significantly increases the resistance of the isolated CF under shear stress conditions. This improvement can be related to the interaction between the PP-like brushes, attached to graphene, giving rise to a certain number of physical entanglements with the matrix chains. The research offers a discussion on the mutual relations among the nanofiller dispersion in the polymer layers, the mechanical properties of the components (especially of those of the interphases) and the in-plane and out-of-plane electrical conductivity as a function of type and content of graphene.

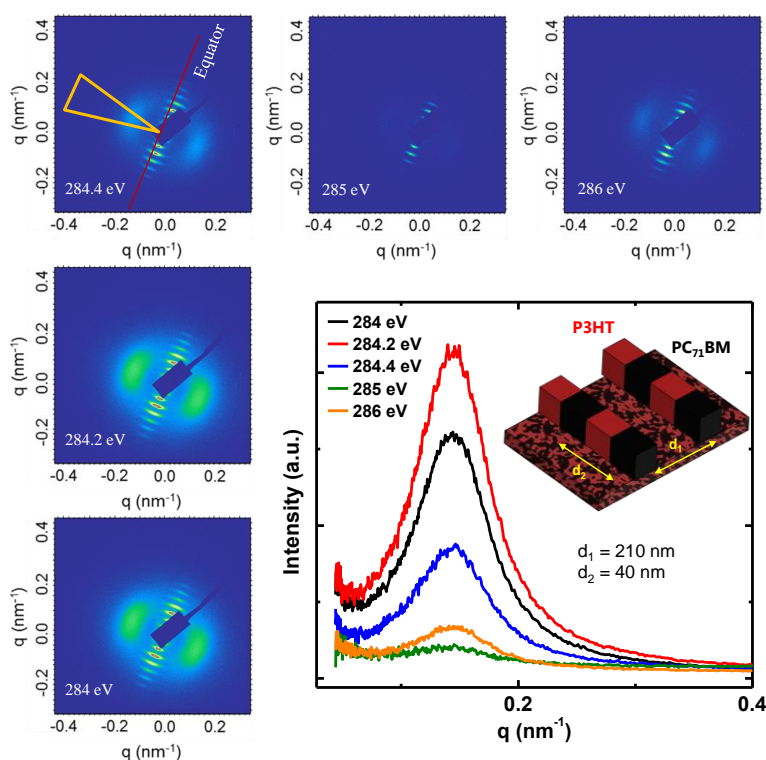


Left column: E' maps obtained over an area of $12.5 \times 12.5 \mu\text{m}^2$, including an isolated CF, using an array of 25×25 indentations of 50 nm in depth. Middle: E' distribution of the data, close to a CF, under the blue squares shown on the left. Right: similar distribution far away from any CF. (a) iPP+CFs; (b) 0.9 vol % G/iPP+CFs; (c) 1.6 vol % G/iPP+CFs.

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

INVESTIGATION OF THE HIERARCHICAL MORPHOLOGY OF NANOSTRUCTURED BULK HETEROJUNCTION PHOTOVOLTAIC THIN FILMS

In collaboration to Dr. Cheng Wang from the Advanced Light Source at Lawrence Berkeley National Laboratory, we have demonstrated that resonant soft X-ray scattering at the carbon K edge is an unambiguous approach to evaluate the phase segregation between donor and acceptor phases across the grooves of a laser-induced periodic surface nanostructure on a paradigmatic poly(3-hexylthiophene)/fullerene bulk heterojunction. By taking advantage of the use of polarized soft X-rays, the results provide direct evidence that the formation of the nanostructure on the surface of the heterojunction induces not only additional phase separation of the two components but also a preferential directional arrangement of the different phases.



EFFECT OF MOLECULAR ARCHITECTURE IN OBTAINING STABLE CHIRAL ASSEMBLIES.

In collaboration with the group of Prof. Luis Oriol of the University of Zaragoza, the assembly of a series of block copolymers sensitive to light that can show chirality when illuminated with polarized light has been studied. Chirality at different hierarchical levels plays a fundamental role in life, conferring unique functionalities to biological systems. The possibility of accessing new hierarchically ordered structures, imitating nature, through the control of chirality at the molecular and supramolecular level has aroused great interest in fields such as asymmetric synthesis, chiral detection, chiral memories or non-linear optics, among others. The polymers studied are synthesized by atomic transfer radical polymerization (ATRP) of propargylic methacrylate and methyl methacrylate and subsequent modification of the side groups were subsequently modified with 2,2-bis (hydroxymethyl) propanoic acid azides decorated with two motifs, two azobenzenes or one azobenzene and one biphenyl. In this way, molecules with photoresponse are obtained. For polymers with low content in the photosensitive block, chirality can be photoinduced, illuminating with circularly polarized light. Its structure has been studied by X-ray diffraction.

EFFECT OF CONFINEMENT ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF SMALL SEMICONDUCTOR ORGANIC MOLECULES.

Many organic optoelectronic devices, such as light-emitting diodes, field-effect transistors and photovoltaic cells, use an ultra-thin active layer in which the organic semiconductor is confined to nano-sized dimensions. The effect of this spatial restriction affects the properties of the material. However, it is not usually studied systematically, despite the possibility to drastically influence its structure and therefore its final performance. In collaboration with Dr. Jaime Martín, from the University of the Basque Country, the effect of confinement on a small semiconductor molecule, p - DTS (FBTTh2), has been studied. It has been observed that spatial confinement can be an efficient tool to control the orientation of the crystal and the general texture of the p-DTS structures (FBTTh2) in a controlled manner, which allows the manipulation of properties, including the characteristics of photoluminescence and cargo transportation. The information obtained from the temperature / confinement diagrams established by differential scanning calorimetry and grazing incidence X-ray diffraction have allowed the identification of specific processing routes that can be extrapolated directly to other functional organic materials, such as polymer semiconductors, ferroelectric...

POLYMER MATERIALES BASED ON: A) PTT AND PTT-PTMO WITH DIFFERENT NANOADDITIVES AND B) BIO-BASED RESOURCES

We have prepared polymer nanocomposites based on poly(trimethylene terephthalate) (PTT) and poly(trimethylene terephthalate)-block-poly(tetramethylene oxide) (PTT-PTMO) copolymers with nanoadditives such as acid functionalized multiwall carbon nanotubes (MWCNT-COOH), expanded graphite (EG) and polyhedral oligomeric silsesquioxane (POSS). Samples at different concentrations were obtained and characterized from a morphological and structural point of view. Moreover, their mechanical, thermal, rheological, electrical and optical properties have been studied. On the other hand, studies are being carried out on materials with a high biodegradable potential, such as aromatic polyesters based on 2,5-furandicarboxylic acid and cycloaliphatic polyesters based on 1,4-cyclohexanedicarboxylic acid and those constituted by block copolymers of poly (butylene terephthalate) and poly(lactic acid), which belong to the type known as thermoplastic elastomers.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

PREDICTING EXPERIMENTAL RESULTS FOR POLYETHYLENE BY COMPUTER SIMULATION

We have reviewed several aspects of computational approaches to polyethylene melt and solid state properties in relation to existing experimental results. Based on 40 years of experience in the field, we have offered a personal view of how computer simulations are helping to understand the physics of polyethylene as a model polymer. The first issue discussed was the molten state of polyethylene, including static and dynamic properties and entanglement features along with their impacts on rheological behaviour. We then examined the glass transition, crystallization process and solid state structure, including the interlamellar region. Finally, brief descriptions of the latest advances in simulating mechanical properties and of the various methodologies used to simulate the physics of polyethylene were given.

ELECTROPHORETIC AND HYDRODYNAMIC PROPERTIES OF THE ERBB2-TRASTUZUMAB MONOCLONAL ANTIBODY COMPLEX

In collaboration with the Oncology department of the Hospital Ramón y Cajal the properties in aqueous solution of complexes formed by the extracellular domain of the receptor transmembrane ERBB2 and Trastuzumab monoclonal antibody have been studied. Overexpression of ERBB2 receptor on cancer cells is mainly associated with a poor prognosis in metastatic breast cancer. Trastuzumab monoclonal antibody is a powerful therapeutic tool in the treatment of this type of cancer. It is therefore of great interest to know in depth the mechanism of interaction of that protein complex. We have developed a computational and experimental study on the hydrodynamic and electrophoretic properties of this complex in its natural environment, aqueous solution, in which the above-mentioned interaction occurs. The results show the presence both 1:1 to 2:1 complexes for the ERBB2:Trastuzumab association, indicating the strong affinity between them. The great flexibility of the system and the correlation between electrostatic properties and macroscopic mobility was also remarkable.

CHIRAL TITANIUM(IV) COMPLEXES CONTAINING POLYDENTATE LIGANDS BASED ON α -PINENE. CATALYTIC ACTIVITY IN SULFOXIDATION WITH HYDROGEN PEROXIDE

The reaction of $\text{TiCl}_{4-n}(\text{OiPr})_n$ ($n = 0, 2, 4$) with various terpenoid preligands based on α -pinene, $\text{C}_7\text{H}_6\text{Me}_3(\text{OH})(\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{G})$ ($\text{G} = \text{NH}_2, \text{I}; \text{NHMe}, \text{II}; \text{OH}, \text{III}$), stereoselectively affords a series of new chiral titanium(IV) complexes. Such complexes are either octahedral, $[\text{TiCl}_2\text{X}(\text{OC}_7\text{H}_6\text{Me}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{G}-\kappa^3\text{N},\text{N},\text{O})]$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{G} = \text{NH}_2, 1; \text{X} = \text{OiPr}, \text{G} = \text{NH}_2, 2; \text{G} = \text{NHMe}, 3$), or trigonal bipyramidal, $[\text{Ti}(\text{OiPr})_3(\text{OC}_7\text{H}_6\text{Me}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{G}-\kappa^2\text{N},\text{O})]$ ($\text{G} = \text{NH}_2, 4; \text{NHMe}, 5$) and $[\text{TiX}(\text{OiPr})(\text{OC}_7\text{H}_6\text{Me}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{O}-\kappa^3\text{N},\text{O},\text{O}^*)]$ ($\text{X} = \text{Cl}, 6; \text{OiPr}, 8$), depending on the acidity of titanium, the reaction conditions and the nature of the pendant ending group of the terpenoid ligand. Density functional theory (DFT) calculations have been carried out to assess the stability of the multiple possible diastereoisomers allowing us to propose structural suggestions. The new titanium complexes efficiently catalyze the selective oxidation of various types of sulfides to either sulfoxides or sulfones using aqueous hydrogen peroxide, under mild conditions. All compounds have been characterized by multinuclear NMR spectroscopy and the molecular structure for some of them has been determined by X-ray diffraction.

EFFECT OF LICHENS COLONIZATION ON CERAMIC ROOFING TILES A COMBINED LASER AND BIOCIDES PROCEDURE FOR ITS REMOVAL.

Biological colonization of ceramic roofing tiles by lichens is a common phenomenon. This study reveals the results of a combined procedure undertaken to assess the removal of lichens on different kinds of unglazed ceramic roofing tiles by treatments based on both dual sequential laser irradiation and treatment using Acticide (R)cent CF biocide. The chemical and mineralogical composition of roofing tiles were characterized by X-ray fluorescence (XRF) spectrometry, optical polarized petrographic microscopy, and X-ray diffraction (XRD). Laser irradiation was accomplished by applying sequences of nanosecond laser pulses at two wavelengths (1064 and 266 nm). After dual sequential laser irradiation, a biocide was applied. To assess the combined effect of both treatments several techniques were used, including stereo and fluorescence (FM) microscopies, scanning (SEM) and transmission (TEM) electron microscopies, and FT-Raman spectroscopy. Chemical composition of the analyzed roofing tiles was shown as a relevant factor regarding the degree of interaction between the biological colonization and the substrate, and hence, the bioweathering effect. The combined procedure has proved to be very effective in ablating cortical layers in all species of lichens and producing the complete damage of both bionts.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

Más allá de campo medio y soluciones exactas en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Code or Reference: FIS2015-63770-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich and Rafael Alejandro Molina Fernández

Duration: January 2016-December 2018

Objectives: Development and application of new techniques for the solution of many-body quantum systems, including extensions of mean field approaches and exact analytical and numerical solutions.

Desarrollo de nuevos modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos mesoscópicos.

Code or Reference: COOPB-20289

Funding Institution: CSIC

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich

Duration: January 2018-December 2019

Objectives: Development of exactly solvable models for the study of the static and dynamic properties of mesoscopic systems. The project will stimulate the exchange of students and the cooperations between groups of the CSIC, Universidad Nacional Autónoma de México y Universidad Veracruzana.

Nuevos modelos para materiales quirales.

Code or Reference: FIS2017-82260-P

Funding Institution: MINECO

Main Researchers: José González Carmona, Tobias Stauber

Duration: January 2018-December 2020

Objectives: Investigation of novel quantum materials with topological and chiral features in the electron propagation, including members of the graphene and chalcogenide families as well as Weyl and nodal-line semimetals.

Quantum information technologies in Madrid+ (QUITTEMAD+).

Code or Reference: S2013/ICE-2801

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid

Main Researcher: Miguel Ángel Martín-Delgado (UCM) / *Participation:* Jorge Dukelsky Bercovich and Rafael Alejandro Molina Fernández

Duration: January 2015-December 2018

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

Núcleos exóticos: Estructura, reacciones e implicaciones de interés astrofísico.

Code or Reference: FIS2014-51.971-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido

Duration: January 2015-December 2018

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

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

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

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: Guillermo A. Mena Marugán and Gianluca Calcagni

Duration: January 2018-December 2020

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

Gravedad y Universo Cuántico: Cosmología de Lazos, Agujeros Negros y Fractales.

Code or Reference: FIS2014-54800-C2-2-P

Funding Institution: MINECO

Main Researchers: Guillermo A. Mena Marugán and Gianluca Calcagni

Duration: January 2015-December 2018 (extended one year)

Objectives: Analysis of the consequences of Loop Quantum Cosmology and of Group Field Theory for cosmological perturbations. Quantization of spherically symmetric spacetimes and black holes in Loop Quantum Gravity. Study of nonlocal quantum gravity of exponential type as well as in multi-scale spacetimes. Development of approximate and numerical methods in quantum cosmology.

Red Consolider Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear (CPAN).

Code or Reference: FPA2017-90687-REDC

Funding Institution: MINECO

Main Researchers: Antonio Pich Zardoya. At IEM: Guillermo A. Mena Marugán

Duration: January 2018-December 2019

Objectives: Network on Particle Physics, Astroparticles and Nuclear Physics for scientific collaboration, interaction and mobility in Spain.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

Code or Reference: FIS2014-54800-C2-2-P

Funding Institution: MINECO

Main Researchers: Guillermo A. Mena Marugán and Gianluca Calcagni

Duration: January 2015-December 2018 (extended one year)

Objectives: Analysis of the consequences of Loop Quantum Cosmology and of Group Field Theory for cosmological perturbations. Quantization of spherically symmetric spacetimes and black holes in Loop Quantum Gravity. Study of nonlocal quantum gravity of exponential type as well as in multi-scale spacetimes. Development of approximate and numerical methods in quantum cosmology.

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

Code or Reference: FIS2016-76418-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: María Luisa Senent Diez

Duration: January 2017-December 2020

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

Anion CosChem Exploring the Chemistry and Spectroscopy of Cosmic Anions.

Code or Reference: Anion Cos Chem ANR-14-CE33-0013

Funding Institution: Agence National de la Recherche ANR (Francia)

Main Researcher: Ludovic Biennier (Instituto de Física de Universidad de Rennes)

Duration: 2014-2018

Acción COST Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CM1401

Funding Institution: COST, UE

Main Researcher: L. Wiesenfeld (Observatorio de Grenoble, Francia). *Management committee (Spain):* M.L. Senent, O. Roncero

Duration: 2015-2018

Acción COST Molecules in Motion, MOLIM.

Code or Reference: CM1405

Funding Institution: COST, UE

Main Researcher: A.G. Császár (U. Eotvos de Budapest, Hungria). *Management committee (Spain):* M.L. Senent, M.P. de Lara.

Duration: 2015-2019

Campos cuánticos y gravitación: simetría cuántica, mecánica estadística y combinatoria.

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

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor and Jesús Salas Martínez (participation of F. Barbero and J. Margalef)

Duration: January 2018-December 2020

Objectives: Research in Gravity, Quantum Field Theory, symmetries, gauge theories, black hole physics and statistical mechanics.

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

Estudio de la estructura y dinámica de Núcleos exóticos.

Code or Reference: 201750I037

Funding Institution: CSIC

Main Researcher: María José García Borge

Duration: December 2017-November 2018

Objectives: This grant allows for participation of experiments and workshops waiting for a larger national grant

HIFI, Un espectrómetro para el estudio de reacciones nucleares en HIE-ISOLDE

Code or Reference: FPA2017-87568-P

Funding Institution: AEI

Main Researcher: María José García Borge

Duration: January 2018 - December 2019

Objectives: This project aims to study the installation of a fragment separator at ISOLDE in order to do spectroscopy of neutron rich nuclei.

Nanobiospectroscopia (Raman y Fluorescencia): Nanosistemas orientados a la biodiagnos y la teranóstica.

Code or Reference: FIS2014-52212-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: January 2015-December 2018

Objectives: Fabrication, characterization and functionalization of metal plasmon nanoparticles with advanced technologies to be applied in the detection of drugs and biomolecular diagnosis.

Plasmonic-Enhanced Techniques for the Analysis of Organic Colorants in Works of Art.

Code or Reference: iLINK1148

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: January 2017-December 2018

Objectives: Application of new plasmonic nanostructures in the study of materials of interest for the Cultural Heritage focused on artworks of the Metropolitan Museum of New York and P. Getty Museum of Los Angeles.

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

Code or Reference: FIS2017-84318-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: January 2015-December 2018

Objectives: Fabrication, characterization and functionalization of metal plasmon nanoparticles with advanced technologies to be applied in the molecular detection of drugs, biomolecules and materials with interest in the Cultural Heritage.

Estudios Experimentales de la Estructura Nuclear Exótica.

Code or Reference: FPA2015-64969-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Olof Tengblad

Duration: January 2016-December 2019

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

Estudios experimentales y teóricos de la estructura de núcleos exóticos.

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researchers: Andrea Jungclaus, J. Luis Egido

Duration: January 2018-December 2020

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

European Nuclear Science and Application Research 2.

Code or Reference: 654002

Funding Institution: Comisión Europea

Main Researcher: Olof Tengblad

Duration: March 2016-February 2020

Objectives: PASPAG aims for Simultaneous detection of Gamma and Particle Radiation by the use of new scintillator materials combined with the phoswich technique. The JRA aims for cost effective, reduced systems in size and complexity that can be used at several of the European facilities for nuclear structure research.

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

Code or Reference: MAT2016-75354-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

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

Duration: January 2017- December 2020

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

Haces Estructurados de Luz y Electrones: Efectos Mecánicos y Magnetoeléctricos en Materia (LENSBEAM).

Code or Reference: FIS2015-69295-C3-2-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: José A. Sánchez Gil

Duration: January 2016-December 2019

Objectives: To investigate theoretically the electromagnetic properties of complex plasmonic, semiconducting and multiferroic nanostructures, with special emphasis on the fundamental aspects of a variety of light-matter interaction properties, in connection with the behaviour of metal/dielectric nanostructures as resonant optical antennas in absorption and emission.

Topological Nanophotonics (NANOTOPO)

Code or Reference: EXPLORA: FIS2017-91413-EXP

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main Researcher: Vincenzo Giannini

Duration: November 2018-October 2020

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

Síntesis de composites de base cemento ecoeficientes y superaislantes a partir de la valorización de residuos y subproductos con alto contenido de sílice y silico-alúmina.

Code or Reference: BIA2015-65558-C3-1-R

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Moisés Frias Rojas (participation: Sagrario Martínez Ramírez)

Duration: January 2016-December 2018

Objectives: New materials development with sustainability proposal.

Tecnologías y conservación de materiales del patrimonio. Geomateriales 2.

Code or Reference: S2013/MIT-2914

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid (CAM)

Main Researcher: Rafael Fort (participation: Sagrario Martínez Ramírez)

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.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES**NanoScreen: Disruptive portable device for pre-screening of Persistent Organic Pollutants –POPs- in food products and water**

Code or Reference: 010103 - 801 - SAF

Company: SAFTRA Photonis Ltd

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés

Duration: 2017-2019

Objectives: Development of plasmonic sensors for detection of pollutants at low concentration in water and foods.

3.3 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

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

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

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla

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

Duration: August 2014-July 2020

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

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

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

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

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez and Salvador Montero Martín

Duration: January 2018-December 2020

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

Hielo, gas y polvo en astrofísica de laboratorio.

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad. **FEDER.**

Main Researchers: María Belén Maté and Isabel Tanarro.

Duration: December 2016-December 2020

Objectives: To provide experimental and theoretical information that can help in the analysis of ices in outer system bodies and in the interstellar medium; generation of carbonaceous residues from the processing of C and H containing ices; characterization of ions and radicals of astrophysical interest by high resolution infrared spectroscopy; diagnostics and kinetic modeling of RF plasmas with astrophysically relevant species; study of analogs of interstellar carbonaceous dust.

Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CMST COST Action CM1401

Funding Institution: European Cooperation in Science and Technology

Main Researchers: Laurent Wiesenfeld

Spanish delegates: Octavio Roncero and M^a Luisa Senent

(IEM Participants: José M. Fernández, Isabel Tanarro, Vicente Timón, Belén Maté and Víctor J. Herrero)

Duration: November 2014-November 2018

3.4 DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Investigación de superficies poliméricas, inorgánicas e híbridas nano y microestructuradas y de sus interacciones: de las bases físico-químicas a sus aplicaciones.

Code or Reference: MAT2015-66443-C2-1-R

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Tiberio A Ezquerra

Duration: January 2016-December 2018

Objectives: The purpose of the project is to advance in the basic understanding of the physico-chemical bases of confinement produced by different advanced processing techniques involved in the nanotechnology of polymer materials, nanocomposites and hybrid systems and in exploiting the peculiarities of the nanostructure/medium interaction in specific applications involving interaction with a gas/fluid (gas sensors and supercapacitors), with an electric field (ferroelectric memories, functional electrodes) or with radiation (photodetectors, phototransducers, photovoltaic heterostructures).

Fibras y tejidos poliméricos avanzados con grafeno, otros materiales 2D y estructuras mesoporosas de fuentes de origen natural.

Code or Reference: MAT2017-88382-P

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Horacio G. Salavagione (ICTP-CSIC)

Duration: January 2018-December 2020

Objectives: Sustainable development of new functional advanced fibres and textiles by the incorporation of 2D laminar materials (graphene, MoS₂, BN).

Control of the nanostructure in polymers with applications in energy. Basic implications in their physical properties and their applicability.

Code of reference: MAT2014-59187-R

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Aurora Nogales / Mari Cruz García

Duration: January 2015-December 2018

Objectives: To obtain deeper knowledge in the understanding of self-assembly phenomena in polymers with potential applications in energy and to control those phenomena in confinement conditions, with the aim of improving their performances.

Cultura Científica a través de la ficción: Quinto y Sexto espectáculos de

Code of reference: FCT-17-12081

Funding Institution: FECYT

Main Researcher: Tiberio Ezquerra Sanz

Duration: March 2018-March 2019

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

CONTRATOS CON LA INDUSTRIA / RESEARCH AGREEMENTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Melt and solid state characterization of PE/EVOH blends from barrier film scrap recycling.

Code or Reference: Research Agreement N° 254654

Company: DOW CHEMICAL IBERICA

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar

Other Participants: Dr. Juan F. Vega, Dr. Javier Ramos and Dra. Virginia Souza-Egipsy

Duration: 1st April 2018 extended until 30th June 2019

Objectives: Optimization of recycling processes.

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

12th International young researchers workshop on GMC (*International non-UE congress*), Padova (Italy), 22nd-24th of January 2018.

- *Understanding the geometry of the Misner spacetime through topology* (Contributed talk), Juan Margalef Bentabol.

41st LQP Workshop "Foundations and Constructive Aspects of QFT" (*International non-UE congress*), Göttingen (Germany), 2nd -3rd of February 2018.

- *Fock quantization of the Dirac field in cosmology with unitary dynamics* (Contributed talk), Beatriz Elizaga Navascués, Jerónimo Cortez, Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán, and José M. Velhinho.

VI Tux Workshop on Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 19th-23rd of February 2018.

- *The Mass of Cosmological Perturbations in the Hybrid and Dressed Metric Approaches to Loop Quantum Cosmology* (Contributed talk), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués, and Daniel Martín-de Blas.

APS March Meeting 2018 (*International non-UE congress*), Los Angeles (USA), 5th-9th of March 2018.

- *Surface and 3D Quantum Hall Effects from Engineering of Exceptional Points in Nodal-line Semimetals* (Oral contribution), José González and R.A. Molina.

2018 ACS March Meeting (*International non-UE congress*), New Orleans (USA), 18th-22nd of March 2018.

- *Exploring the rotational and far infrared spectra of non-rigid species using highly correlated ab initio methods* (Invited talk), María L. Senent.

International Conference on Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Shenzhen (China), 26th-28th of March 2018.

- *Taming the beast: initial conditions and degrees of freedom in nonlocal gravity* (Contributed talk), Gianluca Calcagni.

First BYMAT Conference (*National Congress*), Madrid (Spain), 7th-9th of May 2018.

- *Geometry, constraints, and boundaries. It takes three to tango* (Contributed talk), Juan Margalef Bentabol.

X Jerte Advanced Relativity Meeting (*National congress*), Almería (Spain), May 2018.

- *Feasibility of warp drives* (Invited talk), L.J. Garay.

5th LISA Cosmology Working Group Workshop (*International non-UE congress*), Helsinki (Finland), 11th-15th of June 2018.

- *Testing quantum gravity with LISA* (Contributed talk), Gianluca Calcagni.

Encuentro: Enseñar filosofía en el siglo XXI (*National congress*), Madrid (Spain), June 2018.

- *Mesa redonda: La filosofía como valor cultural* (Invited talk), L.J. Garay.

15th Marcel Grossman Meeting (*International non-UE congress*), Rome (Italy), 1st-7th of July 2018.

- *The Mass of Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology* (Contributed talk), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués, and Daniel Martín-de Blas.
- *Taming the beast: initial conditions and degrees of freedom in nonlocal gravity* (Contributed talk), Gianluca Calcagni.
- *Fermionic Backreaction in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Contributed talk), Beatriz Elizaga Navascués, Guillermo A. Mena Marugán, and Santiago Prado Loy.
- *Let's play with partitions! The distribution of the eigenvalues of the area operator* (Contributed talk), Juan Margalef Bentabol, J. Fernando Barbero G. and Eduardo J.S. Villaseñor.

20th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 23rd-27th of July 2018.

- *Topological protection from exceptional points in Weyl and nodal-line semimetals* (Oral contribution), R.A. Molina, J. González and E. Benito-Matías.

- *Analytical solutions for the surface states in topological semimetals slab geometries* (Poster), E. Benito Matías, R.A. Molina.

5th Korea-Japan joint workshop on Dark Energy (*International non-UE congress*), Daejeon (Republic of Korea), 6th-10th of August 2018.

- *Testing quantum gravity* (Plenary talk), Gianluca Calcagni.

2018 The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (*International non-UE congress*), Bilbao (Spain), 3rd-7th of September 2018.

- *Weak intramolecular interaction effects on the structure and torsional spectra of ethylene glycol isotopologues, an astrophysical species* (Oral contribution), R. Boussessi and M. L. Senent.
- *Spectroscopic characterization of the unsaturated hydrocarbons C_3H and C_5H using highly correlated ab initio methods* (Poster), S. C. Bennedjai, D. Hammoutène, and M. L. Senent.

11th International Workshop on Disordered systems (*International non-UE congress*), Daejeon (Korea), 3rd-7th of September 2018.

- *Generalized fluctuation relations* (Oral contribution), R.A. Molina.

2018 Our Astro-Chemical History: Past, Present, and Future (*UE congress*), Assen (Netherlands), 4th-10th of September 2018.

- *Characterization of neutral and charged forms (anions and cations) of the carbon chains C_3H and C_5H* (Invited talk), S. C. Bennedjai, M. L. Senent, and D. Hammoutène.

2018 COST MOLIM WG1 Conference Intra- and inter-molecular (atomic) interactions (*UE congress*), Copenhagen (Denmark), 24th-26th of September 2018.

- *Weak intramolecular interaction effects on the structure and fir spectra of molecules with various torsional motions: ethylene glycol and its isotopologues* (Invited talk), R. Boussessi and M. L. Senent.

Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions, COMEX6 (*International non-UE congress*), CapeTown, South Africa, 29th of October-2nd of November 2018.

- *Stellar weak-interaction rates from deformed QRPA calculations* (Oral contribution), P. Sarriguren.

X CPAN Days (*National congress*), Salamanca (Spain), 29th-31st of October 2018.

- *Fermionic Perturbations in Hybrid Loop Quantum Cosmology* (Contributed talk), Santiago Prado Loy, Beatriz Elizaga Navascués, and Guillermo A. Mena Marugán.

Cold Atom Workshop (*National congress*), Bilbao (Spain), 16th-17th of November 2018.

- *Generalized fluctuations relations: applications to trapped ions* (Invited talk), R.A. Molina, J. Mur-Petit.
- *Localization and spectral statistics in disordered Floquet 1D lattices* (Poster), E. Benito Matías.

Pedro's Universes (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 3rd-5th of December 2018.

- *Pedro and the WOLF: The Quantum and the Vacuum in Quantum Cosmology* (Plenary talk), Guillermo A. Mena Marugán.

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

Light Magnetoelectric Effects on nanostructures (LIMAGE 2018) (*International non-UE congress*), Donostia, San Sebastián (Spain), 7th-9th of February 2018.

- *Fano resonances and spin angular momentum in single semiconductor nanorods* (invited talk), D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.
- *Magnetic Light in HRI Metafilms through an Electric and Magnetic Dipole Formulation* (oral contribution), D. R. Abujetas, J. J. Sáenz and J. A. Sánchez-Gil.
- *Transparent Metallic Metamaterials* (invited talk), V. Giannini.

IV Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure (*International non-UE congress*), Bornio (Italy), 19th-25th of February 2018.

- *Studies of exotic nuclear structure performed by the MAGISOL collaboration at ISOLDE and HIE-ISOLDE*, (invited talk), O. Tengblad.
- *Total Absorption Spectroscopy for nuclear astrophysics applications: present a future prospects*, (invited talk), E. Náchter.

- *Electron Capture of ^8B into highly excited states of ^8Be* (oral contribution), S. Viñals.

International Conference on Terahertz Emission, Metamaterials and Nanophotonics (TERAMETANANO-3) (*International non-UE congress*), Uxmal (Mexico), 25th-29th of March 2018.

- *Tailoring bright Fano resonances in single high-refractive-index nanorods* (oral contribution), D. R. Abujetas, M. A. G. Mandujano, E. R. Méndez, and J. A. Sánchez-Gil.

Congreso European Geosciences Union General Assembly 2018 (*International non-UE congress*), Viena (Austria), 8th-13th of April 2018.

- *Cements Based On Kaolinite Base Waste* (poster), R. García-Giménez, R. Vigil de la Villa, M. Frías, S. Martínez-Ramírez, I. Vegas, L. Fernández-Carrasco.

International Workshop on Frontiers in Lasers and Applications (FLA 2018) (*International non-UE congress*), Okinawa, Japan. 16th-19th of April 2018.

- *Periodic phase-change structures in silicon: Control and formation mechanism* (invited talk), Y. Fuentes-Edfuf, M. García-Lechuga, D. Puerto, C. Florián, A. Garcia-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solís, J. Siegel.

35th Annual Meeting of the Society for Thermal Medicine (*Internacional non-UE congress*), Tucson (EE.UU.), 7th-10th of May 2018.

- *Temperature changes in metallic nanoparticles estimated by Raman spectroscopy* (oral contribution), J. G. Calvillo-Vázquez, S. Sánchez-Cortés, J. A. Sánchez-Gil, I. Rocha-Mendoza, and E. R. Méndez.

42nd International Symposium on Archaeometry (ISA 2018) (*International Conference*), Mérida (Mexico), 20th-26th of May 2018.

- *Raman and Surface-Enhanced Raman Scattering Analysis of Iron Gallic Inks from Spain and Slovak Republic* (invited lecture), S. Sánchez-Cortés.

14th Nordic Nuclear Physics meeting (*UE congress*), Svalbard (Norway), 22nd-24th of May 2018.

- *Studies of the atomic nuclei by the MAGISOL collaboration at ISOLDE and HIE-ISOLDE* (oral presentation), O. Tengblad, M.J.G. Borge, H. Fynbo, B. Jonson, K. Riisager, T. Nilsson, J. H. Jensen, J. Diaz Ovejas, S. Viñals and M. K. Munch.

VI Jornadas Fical 2018 (*National congress*), Pamplona (Spain), 28th-30th of May 2018.

- *Efecto del disolvente en la síntesis de nanocal* (oral presentation), S. Martínez-Ramírez, L. Rubio, I. Cascales, M. Martín-Garrido, M. Teresa Blanco-Varela.

The European Radioactive Ion Beam Conference (EURORIB 2018) (*UE-congress*), Giens (France), 27th of May-1st of June 2018.

- *Status of the ISOLDE Facility* (invited talk), M.J.G. Borge.

10th International Conference on the Environmental and Technical Implications of Construction with Alternative Materials (WASCON 2018) (*International non-UE congress*), Tampere (Finland), 6th-8th of June 2018.

- *Effect of an Activating agent on the transformation of Coal Waste into a Supplementary Cementing Material: Kinetic Parameters and Heat Evolution* (poster), M. Frías, L. Caneda-Martínez, E. Asensio, M. I. Sánchez De Rojas, E. Villar-Cociña, S. Martínez-Ramírez, R. García, R. Vigil and I. Vegas.
- *Activation of kaolinite based coal waste: chemical and thermal activation and their mineralogy* (poster), M. Casas-Angulo, R. García Giménez, R. Vigil de la Villa, L. Caneda-Martínez, S. Martínez-Ramírez, M. Frías and I. Vegas.

3rd International Conference Nanoplasm 2018 (*International non-UE congress*), Cetraro (Italy), 10th-15th of June 2018.

- *THz Quantum Plasmonics with Topological Insulator Nanoparticles* (invited talk), V. Giannini.

International scientific Meeting on Nuclear Physics (*International non-UE congress*), La Rábida, Huelva (Spain), 18th-22nd of June 2018.

- *Near Coulomb barrier scattering of ^{15}C on ^{208}Pb* (poster), Javier Díaz.
- *Electron capture of ^8B into the highly excited states of ^8Be* (poster), Silvia Viñals.

International Conference on Low-Energy Electrodynamics in Solids (LEEDS) (*International non-UE congress*), Ancona (Italy), 24th-29th of June 2018.

- *Light and Plasmons on topological nanoparticles* (invited talk), V. Giannini.

3rd Workshop of the Nuclear Spectroscopy Instrumentation Network of ENSAR2 (NUSPIN 2018) and AGATA Town Meeting (*International non-UE congress*), Valencia (Spain), 25th-29th of June 2018.

- *Alpha cluster structures in 212Po: status of e693 data analysis* (oral contribution), A. Fernández.

XII Reunión Nacional de Óptica (RNO2018) (*National congress*), Castellón (Spain), 3rd-6th of July 2018.

- *Magnetic light in HRI metafilms through an electric and magnetic dipole formulation* (poster), D. R. Abujetas, J.J. Sáenz, and J. A. Sánchez-Gil.
- *Low-cost, large-size nanoplasmonic sensor based on fano resonances with fast response and high sensitivity* (poster), E. Baquedano, M. U. González, R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, and P. A. Postigo.

Gordon Research Conference -Plasmonics and Nanophotonics- (*International non-UE congress*), Newry (EE.UU.), 8th-13th of July 2018.

- *Topological Nanophotonics with Topological Insulator Nanoparticles and Plasmonics Chains* (invited talk), V. Giannini.

XXVI Reunión Nacional de Espectroscopía-X Congreso Ibérico de Espectroscopía (*International non-UE congress*), Lisbon (Portugal), 9th-11th of July 2018.

- *SERS Nanothermometry* (poster), J. A. Sánchez-Gil, G. Calvillo, C. Ruano, J. C. Otero, S. Sánchez-Cortés, E. R. Méndez.
- *FT-Raman, SERS and DFT studies of the main alkaloids of Syrian Rue*. (oral contribution). M. V. Cañamares, F. Pozzi and J. R. Lombardi.
- *Cement microstructural changes via continuous CO₂ Laser irradiation* (poster), M. Martín-Garrido, S. Martínez-Ramírez, L. Díaz, L. Fernández-Carrasco and D. Torrens.

Gordon Research Conference -Scientific Methods in Cultural Heritage Research, Leading Edge Applications of Data Science, Degradation Science and Conservation Strategies for Cultural Heritage (*International non-UE congress*), Castelldefels (Spain), 22nd-27th of July 2018.

- *Surface-enhanced Raman Spectroscopy and Density Functional Theory computational methods of safflower red dye* (poster and flash presentation), M. V. Cañamares and Marco Leona.

European Nuclear Physics Conference 2018 (*UE congress*), Bologna (Italy), 2nd-7th of September 2018.

- *In-beam gamma-ray spectroscopy of nuclei in the ¹³²Sn region performed at RIKEN* (oral contribution), V. Vaquero and A. Jungclaus.

The 26th International Conference on Advanced Laser Technologies (*International non-UE congress*), Tarragona (Spain), 9th-14th of September 2018.

- *Coherent scatter-controlled phase change grating structures in silicon: Femtosecond-resolved imaging during laser structuring* (plenary talk), Y. Fuentes-Edfuf, M. Garcia-Lechuga, D. Puerto, C. Florian, A. Garcia-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Siegel and J. Solís.

Conference on Lasers in the Conservation of Artworks (LACONA XII) (*UE congress*), Paris (France), 10th-14th of September 2018.

- *213 Nm Laser Ablation as Standalone Approach for Damage-free Removal of Aged Varnishes: a Spectroanalytical Evaluation on Solvent and Oil Terpenoid Coatings* (oral contribution), D. Ciofini, M. Oujja, M. V. Cañamares, S. Siano and M. Castillejo.
- *Multi-analytical characterization of phthalocyanine acrylic paints through spectroscopic, non-linear optical microscopy and interferometric techniques* (oral contribution), A. Dal Fovo, M. Oujja, Mikel Sanz, A. Hernández Martínez, M. V. Cañamares, M. Castillejo and R. Fontana.

11th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications (ICPEPA 11) (*UE congress*), Vilnius, (Lithuania), 10th-14th of September 2018.

- *Periodic phase-change structures in silicon: Control and formation mechanism* (invited talk), Y. Fuentes-Edfuf, M. García-Lechuga, D. Puerto, C. Florián, A. Garcia-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solís and J. Siegel.

International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Related Topics (EMIS 2018) (*International non-UE congress*), CERN (Switzerland), 16th-21th of September 2018.

- *Phoswich scintillator assemblies: Application to the Simultaneous detection of Particle and Gamma radiation – PASPAG* (poster), O. Tengblad.

XI International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum (*International non-UE congress*), Riviera Maya, (Mexico), 24th-28th of September 2018.

- *Ultrafast laser-induced phase-change structures in silicon* (plenary talk), Y. Fuentes-Edfuf, M. García-Lechuga, D. Puerto, C. Florián, A. Garcia-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solís and J. Siegel.

Conferencia Española de NANOFOTÓNICA (CEN2018) (*National congress*), Donostia, San Sebastián (Spain), 3rd-5th of October 2018.

- *Spin angular momentum induced by transverse confinement and intrinsic helicity of guided light: spin-orbit interaction in nanophotonic waveguides* (oral contribution), D. R. Abujetas and J. A. Sánchez-Gil.

X CPAN Days (*National congress*), Salamanca (Spain), 29th-31st of October 2018.

- *Electron Capture and beta+ decay of ^8B into the highly excited states of ^8Be* (oral contribution), Silvia Viñals.

International Conference on Construction Research Eduardo Torroja Architecture, Engineering Ann Concrete (AEC 2018) (*International non-UE congress*), Madrid, 21st-23th of November 2018

- *Coal mining waste: an alternative for the design of metakaolinite-based eco-efficient cements* (oral presentation), M. Frías, L. Caneda, R. García, R. Vigil De La Villa, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco, M. I. Sánchez De Rojas.

ISOLDE Workshop and Users Meeting 2018 (*International non-UE congress*), CERN, Geneva (Switzerland), 5th-7th December 2018.

- *Electron capture of ^8B into highly excited states of ^8Be* (poster), Silvia Viñals.
- *Total Absorption Spectroscopy of $N=Z$ nuclei at ISOLDE: weak-decay rates in the rp-process* (oral contribution), E. Nácher.
- *Study of beta-delayed neutron decay of ^8He* (oral contribution), Z. Janas, A. Bezbakh, A. Ciemny, A. Korgul, A. Kubiela, B. Zalewski, C. Mazzocchi, G. Kamiński, I. Marroquin-Alonso, J. Jensen, K. Johnston, K. Schmitt, M. J. G. Borge et al.
- *Searching for β -delayed protons from ^{11}Be* (poster), N. A. Sokolowska, M. J. G. Borge, A. Ciemny, W. Dominik, A. Fijałkowska, L. M. Fraile, A. Giska, Z. Janas, L. Janiak, G. Kaminski, A.B. Korgul, A. Kubiela, Ch. Mazzocchi, K. Miernik, M. L. Pfutzner, M. Pomorski, J. Ovejas, S. Viñals.
- *Study of the decay of ^{313}In and ^{134}In* (poster), M. Piersa, A. Korgul, L. M. Fraile, J. Benito, E. Adamska, R. Álvarez-Rodríguez, A. E. Barzakh, G. Benzoni, T. Berry, M. J. G. Borge, M. Carmona et al.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

ECONOS 2018 (*International non-EU*), Milan (Italy), 8th-11th of April 2018.

- *SRS study of the first rotational lines of D_2 in the $D_2\text{-He}$ system: pressure broadening, shifting and absolute wavenumber measurements* (Poster), Raúl Z. Martínez and Dionisio Bermejo.

European Vacuum Conference EVC15, (*International UE congress*), 17th-22nd of June 2108, Geneva (Switzerland).

- *Mimicking cosmic dust in the laboratory. The STARDUST machine* (Poster), J.M. Sobrado, G. Santoro, L. Martínez, K. Lauwaet, Y. Huttel, G. Ellis, I. Tanarro, V. Herrero, C. Joblin, J. Cernicharo, J.A. Martín-Gago.

International Symposium on Molecular Spectroscopy, 73rd Meeting, (*International non-UE congress*), 18th-22nd of June 2108, Champaign-Urbana, Illinois, (USA).

- *Radio astronomy receivers and a gas reaction chamber for laboratory astrochemical simulations* (Oral presentation), José Cernicharo, Juan R. Pardo, Juan Daniel Gallego, Pablo de Vicente, Isabel Tanarro, Víctor José Herrero, J. L. Doménech, Ramón Peláez.
- *Laboratory Detection of Vibration-Rotation Transitions of $^{12}\text{CH}^+$ and $^{13}\text{CH}^+$ and Improved Measurement of Their Rotational Transition Frequencies* (Oral Contribution), J. L. Doménech, P. Jusko, S. Schlemmer and O. Asvany.

45th European Physical Society Conference on Plasma Physics, (*International UE congress*), 2nd-6th of July 2108, Prague (Czech Republic).

- *Using radioastronomy techniques and cold plasmas to study transient and stable molecular species of astrophysical interest: a proof of concept*. (Plenary lecture), I. Tanarro, B. Alemán, E. Moreno, R. J. Peláez, J. L. Doménech, V. J. Herrero, P. de Vicente, J. D. Gallego, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, J. R. Pardo, J. Cernicharo, C. Bermúdez, S.I. Ramírez, F. Beltrán, J. M. Hernández.

XII Reunión Nacional de Óptica, (*National congress*), Castellón, España, 3rd-6th July 2018.

- *Survival of glycine on ices on the surface of Mars* (Poster). Victoria Hoyos, Rodrigo Álvarez, Belén Maté.

XXVI Reunión Nacional de Espectroscopía y X Conferencia Ibérica de Espectroscopia, (*International Spain-Portugal congress*), 9th-11th of July 2108, Lisbon (Portugal).

- *Molecular dynamics prediction of near-IR spectra of astrophysical interest* (Poster), Rafael Escribano, Pedro C. Gómez, Belén Maté, Germán Molpeceres, Emilio Artacho.
- *Infrared band strengths and optical constants of solid methanol* (Poster), Belén Maté, Germán Molpeceres, Miguel Ángel Satorre, Ramón Luna, Juan Ortigoso.
- *DFT and experimental IR spectra of adsorbed and UV-processed glycine on bentonite: a Martian study* (Oral presentation), Vicente Timón, Miguel Ángel Moreno, Rafael Escribano, Víctor Herrero, Isabel Tanarro and Belén Maté.

Cryo2018. 55th Annual Meeting of the Society for Cryobiology (*International non-UE congress*), Madrid, 10th-13th of July 2018

- *Measuring the Temperature of the Coldest Liquid Water* (Invited talk), C. Goy, A. Kalinin, A. Schottelius, N. Petridis, R. E. Grisenti, G. Tejada, and J. M. Fernández.

Europhysics Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, ESCAMPIG 2018, (*International UE congress*), 17th-21st of July 2108, Glasgow (UK).

- *Member of the International Scientific Committee*, I. Tanarro.
- *Chairperson of session*, I. Tanarro.
- *STARDUST: experimental station for generation, processing and diagnostics of nanoparticles of astrophysical interest*. (Poster), L. Martínez; K. Lauwaet; G. Santoro; J. M. Sobrado; R. J. Peláez; I. Tanarro; V. J. Herrero; G. Ellis; J. Cernicharo; C. Joblin; Y. Huttel; J. A. Martín-Gago.
- *Carbonaceous dust and films generation in capacitively and inductively coupled RF discharges* (Poster). R. J. Peláez, P. G. Molpeceres, B. Maté, I. Tanarro, V. J. Herrero.

31st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (*International non-UE congress*), Glasgow (UK), 23rd-27th of July 2018.

- *Onset and Near-field Flow Evolution in Supersonic Jets of H₂* (Invited talk), S. Montero.
- *Diagnostics of D₂ and D₂+He Supersonics Jets by Raman Spectroscopy* (Poster), G. Tejada, J. M. Fernández, and S. Montero.

The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, (*International non-UE congress*), 3rd-7th of September 2108, Bilbao (Spain).

- *Collisional broadenings and shifts in the S₀(0), S₀(1) and S₀(2) rotational lines of HD perturbed by He*. (Poster), Dionisio Bermejo, Raúl Z. Martínez, Franck Thibault and Piotr Wcislo.
- *The NANOCOSMOS gas cell: A broadband Fourier transform millimeter wave spectrometer based on radio astronomy receivers*. (Oral presentation), José Cernicharo, Francisco Beltrán, Celina Bermúdez, José Luis Doménech, Juan Daniel Gallego, Víctor Herrero, Ramón Peláez, Sandra I. Ramírez, Isabel Tanarro.
- *Accurate Rotational Frequencies of Deuterated Ammonium Ions (d1-d3) measured in a Cryogenic Ion Trap* (Oral contribution), J. L. Doménech, O. Asvany and S. Schlemmer.
- *New Spectral Characterization of Dimethyl-ether Isotopologues in the THz Region* (Poster), J. M. Fernández, G. Tejada, M. Carvajal, and M. L. Senent.

Our Astro-Chemical History: Past, Present, and Future. Assen, The Netherlands, 10th-14th of September 2018.

- *"Densities, infrared band strengths and optical constants of solid methanol."* (Oral presentation), Ramón Luna; Germán Molpeceres; Juan Ortigoso; Miguel Ángel Satorre; Manuel Domingo; and Belén Maté.

8th International Workshop on Plasma Spectroscopy, (*International congress*), 23rd-26th of September 2108, Oxford (UK).

- *Proof of concept and progress on the use of radio-astronomy emission techniques and cold plasmas to study molecular species of astrophysical interest* (Oral presentation), I. Tanarro, R. J. Peláez, J. L. Doménech, V. J. Herrero, C. Bermúdez, E. Moreno, P. de Vicente, J. D. Gallego, F. Beltrán, J. M. Hernández, S.I. Ramírez, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago, B. Alemán, J. R. Pardo, J. Cernicharo.

Workshop on Interstellar Matter 2018, (*International non-UE workshop*), 14th-16th of November of 2018, Sapporo (Japan), Session chairman and Oral presentation.

- *IR spectroscopy and energetic processing of methyl isocyanate ice* (Poster), V. J. Herrero, B. Maté, G. Molpeceres, V. Timón, I. Tanarro, R. Escribano and R.J. Peláez.
- *Methanol band strength changes due to density variations* (Oral contribution), M.A. Satorre, G. Molpeceres, R. Luna, J. Ortigoso, M. Domingo, R. Escribano, C. Santonja, B. Maté.
- *Infrared relaxation in Hydrogenated Amorphous Carbon chemical analogs* (poster) G. Molpeceres, B. Maté, J. Ortigoso, H.A. Galué.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

E-MRS Spring Meeting (UE congress), Strasbourg (France), 18th-22nd of June 2018.

- *In situ real-time characterization of block copolymer self-assembly processes by GISAXS*, (Oral contribution) M. Fernández-Regúlez; L. Evangelio; S. Gottlieb; G. Rius; J. Fraxedas; F. Perez-Murano; H. Amenitsch; E. Gutiérrez; A. Nogales; M.C. García-Gutiérrez; T.A. Ezquerra.
- *Self-assembly morphology of block copolymers in sub-10 nm wide topographical guiding patterns* (Poster), S. Gottlieb; B. Rösner; L. Evangelio; M. Fernández-Regúlez; A. Nogales; M.C. García-Gutiérrez; T.F. Keller; T.A. Ezquerra; C. David; F. Pérez-Murano.
- *Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Poly(ether-ester)(PEE) block copolymer thin films*. (Oral contribution), R.I. Rodríguez-Beltrán, E. Gutiérrez, A. Linares, A. Nogales, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, P. Moreno, E. Rebollar, T. A. Ezquerra.
- *Functional Nanostructured Surfaces Induced by Laser Irradiation on Fullerene Materials* (Poster), E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, E. Rebollar.

18th European Conference on Composite Materials (UE congress), Atenas (Greece), 24th-28th of June 2018.

- *Nanoindentation of graphene-reinforced polypropylene nanocomposites laminated with carbon fibres* (Oral contribution), Patricia Enrique-Jiménez, Susana Quiles, Horacio J. Salavagione, Marián A. Gómez-Fatou, Fernando Ania and Araceli Flores.
- *Development of multifunctional PEEK nanocomposites based on graphene* (Oral contribution), Susana Quiles-Díaz, Aránzazu Martínez-Gómez, Patricia Enrique-Jiménez, Horacio J. Salavagione, Araceli Flores, Fernando Ania y Marián A. Gómez-Fatou.

CNMAT2018 Congreso Nacional de Materiales (UE congress), Salamanca (Spain), 4th-6th of July 2018.

- *LIPSS formation on poly (trimethylene terephthalate)-poly (tetramethylene oxide) block copolymer reinforced with Silicon Carbide* (Oral contribution), R. I. Rodríguez-Beltrán, E. Gutiérrez, A. Linares, A. Nogales, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, T.A. Ezquerra, P. Moreno, E. Rebollar.

BDS 2018 (10th Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and Its Applications) (International Non-UE congress), Brussels (Belgium) 29th-31st of August 2018.

- *Introduction to dielectric relaxation Case study: performing 'bulk' experiments in nanoconfined systems* (Tutorial Lecture), A. Nogales.
- *Relaxations and Relaxor-Ferroelectric-like Response of Poly(vinylidene fluoride) confined in cylindrical nanocavities* (Invited talk), A. Nogales, J Martín.
- *Dielectric relaxation of novel biodegradable aliphatic-aromatic block copolymers* (Poster), T.A. Ezquerra, I. Irska, A. Linares, A. Nogales, E. Piesowicz, Z. Roslaniec.

SRPS 2108 (Synchrotron Radiation in Polymer Science 2018) (International Non-UE congress), Gyeongju (Korea) 4th-7th of September 2018.

- *Hierarchical morphology and confinement in nanostructured polymer blends investigated by Nanofocus X-ray beams and Resonant Soft X-ray Scattering* (Invited talk), A. Rodríguez-Rodríguez, T.A. Ezquerra, E. Rebollar, J.J. Hernández, I. Puente-Orench and M.C. García-Gutiérrez.
- *Nanostructure and Function of Fullerene and Polymer/Fullerene Gratings as Revealed by Grazing Incidence X-ray Scattering and Atomic Force Microscopy* (Invited talk), E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, E. Rebollar.
- *X Ray Photon Correlation Spectroscopy for the study of polymer dynamics*. (Invited talk), A. Nogales.

E-MRS Spring Meeting (UE congress), Warsaw, Poland, 17th-20th of September 2018.

- *Electric field-assisted alignment of PEDOT:PSS* (Oral Contribution), I.A. Gabaldón-Saucedo, E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M. C. García-Gutiérrez, A. Varea, A. Nogales, E. Rebollar, A. Vilà, T. A. Ezquerra, A. Cirera.
- *Nanostructuring of PEDOT:PSS films by laser treatment* (Poster), I.A. Gabaldón-Saucedo, E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M. C. García-Gutiérrez, A. Varea, A. Nogales, A. Vilà, E. Rebollar, T. A. Ezquerra, A. Cirera.
- *Induced arrangement of P3HT by Inkjet Printing Technology* (Poster), I.A. Gabaldón-Saucedo, E. Gutiérrez, A. Rodríguez-Rodríguez, M. C. García-Gutiérrez, A. Varea, A. Nogales, E. Rebollar, A. Vilà, T. A. Ezquerra, A. Cirera.

XV Reunión del Grupo Especializado de Polímeros GEP (National), Punta Umbría, Huelva (Spain), 24th-27th of September 2018.

- *Resolving the interphase of hierarchical composites of graphene/iPP and carbon fibres by nanoindentation* (Oral contribution), Patricia Enrique-Jiménez, Susana Quiles, Horacio J. Salavagione, Marián A. Gómez-Fatou, Fernando Ania and Araceli Flores.
- *Studying crack formation on cast films of PLLA/PEO blends* (Oral contribution), Javier Martínez de Salazar, Juan Francisco Vega, Anna Espasa-Valdepeñas, Virginia Souza-Egipsy, Alejandro J. Müller.
- *Approaching short time dynamics of polymer solutions by passive microrheology* (Oral contribution), Juan Francisco Vega, Anna Espasa-Valdepeñas, Alejandro J. Müller, J. Martínez-Salazar.

10th ECNP International Conference on Nanostructured Polymers and Nanocomposites (UE congress), San Sebastián (Spain) 3th-5th of October 2018.

- *Nanostructuring of PEDOT:PSS thin films by laser and its influence on its electrical properties* (Oral contribution), E. Gutiérrez, I. Gabaldón, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Cirera, A. Varea, A. Vilà, T.A. Ezquerro, E. Rebollar.
- *Nanostructuring of PEDOT:PSS thin films by laser and its influence on its electrical properties* (Poster), E. Gutiérrez, I. Gabaldón, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Cirera, A. Varea, A. Vilà, T.A. Ezquerro, E. Rebollar.
- *Semiconducting polymer nanoparticles: physical properties and potential applications* (Poster), E. Gutiérrez-Fernández, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, S. Marina Barbier, J. Martín and A. Nogales.

4th International Symposium on DSA (International Non-UE congress), Sapporo (Japan) 11th-13th of November 2018.

- *Extracting Block copolymer dynamics from GISAXS* (Oral contribution), M. Fernández-Regúlez, E. Solano, S. Gottlieb, C. Pinto-Gómez, L. Evangelio, G. Rius, J. Fraxedas, F. Pérez-Murano, H. Amenitsch, E. Gutiérrez, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, T. Ezquerro.

4.2. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO VISITORS

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

- ❖ **Dr. Jordi Mur Petit**, University of Oxford, 7th-12th of May 2018.
- ❖ **Gerardo Ortiz**, Indiana University, 27th of May-2nd of June 2018.
- ❖ **Jorge Hirsch**, Universidad Nacional Autónoma de México, 28th of May-9th of June 2018.
- ❖ **Sergio Lerma**, Universidad Veracruzana. México, 28th of May-9th of June 2018.
- ❖ **Prof. Gabriela González**, Louisiana State University, Baton Rouge, USA, 6th-12th of July 2018.
- ❖ **Prof. Jorge Pullin**, Louisiana State University, Baton Rouge, USA, 9th-11th of July 2018.
- ❖ **Prof. A.N. Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 2nd-16th of October 2017.
- ❖ **Prof. M. K. Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 2nd-16th of October 2017.
- ❖ **Prof. J.A. Caballero**, Universidad de Sevilla, 8th-9th of October 2018.
- ❖ **Prof. Jerónimo Cortez Quezada**, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 13th-22nd of October 2018.
- ❖ **Sergio Lerma**, Universidad Veracruzana, México. 8th-30th of December 2018.

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

- ❖ **Dr. Belén Hernández** Associated Professor, Université Paris 13, Paris, France, 6th-10th of February 2018.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, Full Professor, Université Paris 13, Paris, France, 6th-10th of February 2018.
- ❖ **Prof. Claudio Saitz**, Full Professor, Faculty of Sciences, Universidad de Chile, 11th-13th of February 2018.
- ❖ **Ms. Xuanyi Wu**, University of California Los Angeles (EE.UU.), 20th of April-15th of September, 2018.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 26th-27th of April 2018.
- ❖ **Ms. Giulia Vanucci**, Master Student, University of Bologna, Italy, 1st May-30th of November 2018.
- ❖ **Dr. Federica Pozzi**, Scientist, Metropolitan Museum of New York, New York (EE.UU.), 16th-22nd of July 2018.
- ❖ **Dr. Zohreh Chahardoli**, Erasmus Student, University of Bologna, Italy, 3rd of September-2nd of December 2018.

- ❖ **Mr. Rafael Gonçalves Rubira**, PhD Student, Presidente Prudente Campus of Statal University of Sao Paulo, Brasil, 12th of September 2018.
- ❖ **Prof. John Lombardi**, City College of New York (EE.UU.), 26th-31st of October 2018.
- ❖ **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 20th of October-5th of November 2018.
- ❖ **Dr. Andrés Illana Sisón**, Laboratori Nazionali di Legnaro LNL, Italy, 18th-21st of December 2018.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Mr. Li Zi Hao**, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong, China, 1st of June-30th of August 2018.

4.3. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Dr. William Cuervo.

UNAM, México.

Loop Quantum Effective Geometry and Schwarzschild Singularity: Exact Results.

24th of April 2018.

Prof. Gabriela González.

Louisiana State University (USA).

Astronomía de Ondas Gravitacionales.

9th of July 2018.

Prof. Jorge Pullin.

Louisiana State University (USA).

La Telenovela de las Ondas Gravitacionales.

12th of July 2018.

Serie de seminarios “De Madrid al Cosmos”:

Dr. Eduardo Martín.

Institute for Quantum Computing, Waterloo (Canada).

Can Relativity and Quantum Theory Learn to Speak the Same Language? The Hitchhiker’s Guide to Relativistic Quantum Information.

20th of December 2018.

Dr. Francisco Najarro.

CAB-CSIC.

Trazando el Agujero Negro en el Centro de la Vía Láctea a través de las Estrellas Masivas.

14th of December 2018.

Dra. Esperanza López.

IFT-CSIC, Universidad Autónoma de Madrid.

What Gravitational Collapse Can Tell us about Quantum Field Theory Thermalisation.

29th of November 2018.

Dr. Vincenzo Giannini.

IEM-CSIC.

On the Non-Local Surface Plasmon Contribution to the Casimir Force.

15th of November 2018.

Prof. Jerónimo Cortez.

UNAM, México.

*Un Breve Recorrido por la Cuantización de Campos en Fondos Curvos.*18th of October 2018.**Dr. Miguel Zumalacárregui.**

Louisiana State University (USA).

*No LIGO MACHO: The Dark Universe in the Gravitational Wave Era.*12th of July 2018.**Prof. Jorge Pullin.**

Louisiana State University (USA).

*Avances Recientes en Gravedad Cuántica de Lazos con Simetría Esférica.*11th of July 2018.**D. Franco Dante Albareti.**

IFT-CSIC, Universidad Autónoma de Madrid.

Thermal Scalar Fields under Gravitational Effects.

28th of June 2018.**Dra. Ana Alonso Serrano.**

AEI, Postdam (Germany).

*Black Hole Evaporation: Entropy Analysis and GUP Corrections.*14th of June 2018.**Dr. Carlos García.**

IFF-CSIC.

*Dark Energy from Alpha-Attractors: Phenomenology and Observational Constraints.*31st of May 2018.**Dra. Mar Bastero Gil.**

Universidad de Granada.

*Inflation and Initial Conditions: The Role of Fluctuation-Dissipation Dynamics.*17th of May 2018.**Dr. Wolfgang Wieland.**

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).

*Loop Gravity without Spin Networks.*3rd of May 2018.**Dr. Gianluca Calcagni.**

IEM-CSIC.

*Taming the Beast: Initial Conditions and Degrees of Freedom in Non-Local Gravity.*19th of April 2018.**Dr. Álvaro de la Cruz Dombriz.**

University of Cape Town and SKA Cosmology, Cape Town (South Africa).

*Towards new constraints in extended theories of gravity: large-scale structures, neutron stars and SKA.*5th of April 2018.**D. José María Ezquiaga.**

IFT-CSIC, Universidad Autónoma de Madrid.

*Testing the Dark Universe with Gravitational Waves.*8th March 2018.**Dra. Mercedes Martín Benito.**

Universidad Complutense de Madrid.

*Primordial Fluctuations in Loop Quantum Cosmology.*22nd of February 2018.

Dr. Carlos Sopena.

ICE-CSIC, Universidad Autónoma de Barcelona.

*From LISA Pathfinder to LISA: Enabling the Science of the Gravitational-Wave Low-Frequency Band.*8th February 2018.**Prof. Luis Vázquez.**

Universidad Complutense de Madrid.

*Fractional Calculus as a Modelling Framework.*25th of January 2018.**D. Marcos López Moya.**

Universidad Complutense de Madrid.

*Astrofísica Gamma y Física Fundamental con MAGIC.*11th of January 2018.**4.3.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Dr. Andrés Illana**

Laboratori Nazionali di Legnaro LNL, Italy.

*Dispersión del skin ⁸He en torno a la barrera y otros estudios experimentales.*19th of December 2018.**Prof. John R. Lombardi.**

The City College of New York (USA).

*Recent Advances in SERS for Sensing Devices.*30th of October 2018.**4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS****Prof. Luis Bañares.**

Universidad Complutense de Madrid

Femtoscopia: Láseres ultrarrápidos para observar y manipular reacciones químicas.

Ciclo oficial de coloquios IEM 2018-2019

13th of December 2018.**4.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS****Dr. Javier Cortés.**

Jefe de Sección de cáncer de mama y tumores ginecológicos del Hospital Universitario Ramón y Cajal.

*Presente y futuro en la lucha contra el cáncer de mama: la eficacia de la terapia antiHER2.*1st of February 2018.

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

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy. Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria. 4th-10th of March 2018.

Eduardo Garrido Bellido.

- Institute for Physics and Astronomy. University of Aarhus, Denmark. 11th-24th of November 2018.

Guillermo A. Mena Marugán.

- Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany, 14th-20th of May 2018.

Gianluca Calcagni.

- University of Nagoya, Japan, 22nd-29th of November 2018.
- KASI, Daejeon, Republic of Korea, 5th-12th of August 2018.
- University of Nagoya, Japan, 23rd-31st of July 2018.
- University of Rome La Sapienza, Italy, 1st-7th of July 2018.
- SUSTech, Shenzhen, China, 21st -28th of March 2018.
- Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 13th-20th of March 2018.

Álvaro Rubio García.

- Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual, Benasque, Spain, 1st-14th of July 2018.

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

María José García Borge.

- CERN, Geneva, Switzerland, 1st of August-31st of October 2018.

Santiago Sánchez Cortés.

- Dipartimento di Scienza e Tecnologia Agro-Alimentari, University of Bologna, Italy, 14th-21st of February 2018.
- Department of Biophysics, University "P. J. Safarik of Kosice", Slovak Republic, 17th-21st of June, 30th of July-23rd of August, 24th -28th of November 2018.
- The Metropolitan Museum of Art and The City College of New York, New York (EE. UU.), 6th-21st of July, 11th-18th of November 2018.
- Universidad de Chile, Universidad Playa Ancha de Valparaíso y Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Santiago de Chile, 3rd-12th of December 2018.

Olof Tengblad.

- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 9th-24th of April 2018.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 31st of July-24th of August 2018.
- ISOLDE, CERN, Geneva, Switzerland, 29th of October-7th of November 2018.
- CRACOVIA, 3rd-11th of November 2018.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- The Metropolitan Museum of Art of New York and The City College of New York, New York (EE.UU.), 16th of November-17th of December 2018.

Enrique Nácher González.

- CERN, Geneva, Switzerland, 13th-20th of April 2018.

Álvaro Fernández Martínez.

- GANIL, Caen, France, 18th-29th of July 2018.
- RIKEN, Tokyo, Japan, 20th-31th of October 2018.

Javier Díaz Ovejas.

- JYFL Accelerator laboratory, Jyväskylä, Finland, 22nd-30th of January 2018.
- CERN, Geneva, Switzerland, 18th-24th of April 2018.
- CERN, Geneva, Switzerland, 1st August-31st of October 2018.
- CERN, Geneva, Switzerland, 12th-22nd of November 2018.

Víctor Vaquero Soto.

- RIKEN, Tokyo, Japan, 3rd-31st of October 2018.

Silvia Viñals i Onses.

- JYFL accelerator laboratory, Jyväskylä, Finland, 22nd-30th of January 2018.
- CERN, Geneva, Switzerland, 12nd-24th of April 2018.
- CERN, Geneva, Switzerland, 1st July-30th of September 2018.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Rafael Escribano Torres.**

- Cavendish Laboratory, Universidad de Cambridge, Reino Unido, tres meses, May-July 2018, “Modelos teóricos de hielos astronómicos”, Sabático Salvador de Madariaga del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte, PRX17/00126.

José Luis Doménech Martínez.

- I. Physicalisches Institut, Universität zu Köln, Cologne, Germany, 3rd-31st of May 2018.

Germán Molpeceres de Diego.

- Universidad de Stuttgart, tres meses, March-May 2018. Proyecto: "La importancia del efecto túnel en procesos gas grano en nubes moleculares". Estancia predoctoral.

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

Eduardo Garrido Bellido

- Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. El problema de tres cuerpos en Mecánica Cuántica. 1st of March 2018 – 30th of June 2018, 150 hours.

Guillermo A. Mena Marugán

- Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. 1st of February 2018 – 1st of June 2018, 300 hours (dos alumnos).

Luis J. Garay Elizondo

- Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. *Métodos Matemáticos I*. 12th of September 2018 – 29th of January 2019, 2 groups, 46.5 hours each group.
- Universidad para los mayores (National Official), Universidad Complutense de Madrid. *Universo, Espacio y Tiempo: de la Filosofía Griega a la Cosmología Cuántica*. 29th of January 2018 – 14th of May 2018, 12 hours.
- Curso de formación de profesores (National Official), Centro Territorial de Innovación y Formación Madrid-Sur, Leganés. *Del Átomo al HIGGS. Una introducción a la física cuántica, las partículas elementales y la gravedad*. 19th November-13th December 2018, 9 hours.

Enrique Benito Matías

- Doble grado en derecho y ADE (National Official), Universidad Rey Juan Carlos. *Matemáticas empresariales*. September 2018 – December 2018, 60 hours.

Óscar Moreno Díaz

- Máster Universitario en Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid. Energía Nuclear. 12th of September 2018 – 20th of December 2018, 43 hours.
- Máster Universitario en Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid. Sistemas y Reactores de Fisión. February 2018 – June 2018, 40,5 hours.
- Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. Estructura de la Materia. February 2018 – June 2018, 32 hours.

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

M^a Vega Cañamares Arribas

- Chemical Sensors and Biosensors –Master Erasmus Mundus “*Molecular nano- and bio-photonics for telecommunications and biotechnologies*” (*Monabiphot*) (International) – Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Spain, 23th of February 2018, 2 hours.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Curso Química del Cemento “Tomás Vázquez”* –Curso Posgrado CSIC (International) – CSIC-IECA, Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja”, Madrid, Spain, 6th-16th of March 2018, 5 hours.
- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio Histórico-Artístico* –Curso de “Iniciación a la investigación en Estructura de la Materia: De las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular” (National Official), CSIC, Madrid, 20th-22nd of May 2018, 1 hour.

Enrique Nácher González

- *Técnicas Experimentales* en Física Nuclear (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla, 8th-12th of January 2018, 10 hours.
- *Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Material* (teoría) –European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering physics (International) – Universidad Carlos III de Madrid, 4th of February-24th of May 2018, 10 hours.

M^a Paz Sevilla Sierra

- *Física Aplicada a Farmacia* (Prácticas de Laboratorio) –1º Grado de Farmacia (National Official) – Universidad Complutense de Madrid, October 2018, 15 hours.
- *Fisicoquímica Farmacéutica* (Prácticas de Laboratorio) –2º Grado de Farmacia (National Official) – Universidad Complutense de Madrid, September and October 2018, 60 hours.
- *Fisicoquímica Farmacéutica* (Teoría) –2º Grado de Farmacia (National Official) –, Universidad Complutense de Madrid, August-December 2018, 60 hours.
- *Fisicoquímica Farmacéutica* (Teoría) –2º Doble Grado en Farmacia, Nutrición Humana y Dietética (National Official) – Universidad Complutense de Madrid, August-December 2018, 60 hours.
- *Fisicoquímica Farmacéutica* (Prácticas) –2º Doble Grado en Farmacia, Nutrición Humana y Dietética (National Official) – Universidad Complutense de Madrid, October 2018, 30 hours.
- *Resonancia Magnética Nuclear, Ultrasonidos e Imagen Molecular* –Máster Universitario en Física Biomédica, (National Official) – Universidad Complutense de Madrid, May 2018, 6 hours.

Álvaro Fernández Martínez

- *Técnicas Experimentales en Física Nuclear* (Prácticas de Laboratorio) – Master Interuniversitario de Física Nuclear (National Official) – Universidad de Sevilla, 14th-18th of January 2018, 12 hours.

Diego Romero Abujetas

- *Técnicas Experimentales III* – Grado en Física (National Official) – Universidad Autónoma de Madrid. January-March 2018, 40 hours.

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Belén Maté Naya**

- Tutora Prácticas Externas Curriculares, *Grado en Ciencias Experimentales* (National Official), Universidad Rey Juan Carlos de Madrid. 1st of February-30th of April 2018.

Vicente Timón Salinero

- Tutor Prácticas Externas Curriculares, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. 5th of February 2018–23rd of March (dos alumnos).
- Tutor Prácticas Externas Extracurriculares, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid. 9th-25th of April (dos alumnos).

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Javier Martínez de Salazar Bascuñana**

- Tutor de Prácticas Externas Curriculares – Física – Grado – Nacional – Convenio con la Universidad Complutense de Madrid. 1st of October-15th of December 2018, 165 hours.
- Tutor de Prácticas Extra-Curriculares – Física – Grado – Nacional – Convenio con Universidad Complutense de Madrid. 16th of December 2018-30th of June 2019, 300 hours.

Araceli Flores Aguilar-Amat

- *Experimental testing for mechanical characterization* – Programa del Máster de Ingeniería de Materiales, ETSI Caminos, Canales y Puertos, (International), Universidad Politécnica de Madrid, 29th of October 2018, 2 hours.
- Tutor Prácticas Externas Curriculares, *Grado en Ingeniería en Diseño Industrial y Desarrollo de Producto* (National Official), Universidad Politécnica de Madrid. 17th of December 2018–17th of June 2019.

Mari Cruz García Gutiérrez

- Tutora Prácticas Externas Curriculares - Grado *Recubrimientos orgánicos con aplicación en Nanotecnología y Optoelectrónica*—Prácticas externas- Grado – (National Official) – Universidad Complutense de Madrid 5th of February-31st of May 2018, 136 hours (dos alumnos).

Juan Francisco Vega Borrego

- Tutor de Trabajo de Fin de Grado – Materiales – Grado – Nacional – Convenio con Universidad Rey Juan Carlos. 1st of October 2018-30th of June 2019, 300 hours.
- Asignatura de Reología (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas. 15th of February-9th of March de 2018, 20 hours.

Javier Ramos Díaz

- *Herramientas computacionales aplicadas al estudio de la estructura y dinámica de polímeros* - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas. 20th of February 2018, 1 hour.
- Tutor de Prácticas Externas Curriculares – *Grado en Química* – Nacional – Universidad de Alcalá. 1st of February-31st of May 2018.

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS

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

Jesús Fernando Barbero González

- *Constrained Hamiltonian Systems*, Facultad de Física, Universidad de Valencia, 10th-12th of January 2018.
- *On the distribution of the eigenvalues of the area operator in loop quantum gravity*, Faculty of Science, Radboud University, Nijmegen (The Netherlands), 11th of September 2018.

Gianluca Calcagni

- *Taming the beast: initial conditions and degrees of freedom in nonlocal gravity*, Universidad Complutense, Madrid, 19th of April 2018.
- *Status of multifractional theories*, Sungkyunkwan University of Suwon, Republic of Korea, 2nd of August 2018.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- *Generalized fluctuation relations*, Instituto de Ciencia de Materiales, Madrid (Spain), 29th of September 2018.

Luis J. Garay Elizondo

- *Gravitationally bouncing till the end: black stars*, IFT, UAM-CSIC, Madrid (Spain), 2018.

Juan Margalef Bentabol

- *Let's play with partitions! The distribution of the eigenvalues of the area operator*, 15th Marcel Grossmann Meeting, Rome (Italy), 1st-7th of July 2018.
- *Geometry, constraints, and boundaries. It takes three to tango*, First BYMAT Conference, Madrid (Spain), 7-9 of May 2018.
- *Understanding the geometry of the Misner spacetime through topology*, 12th International young researchers workshop on GMC, Padova (Italy), 22th-24th of January 2018.

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

M^a José García Borge

- *Física Nuclear (1): Anatomía de un experimento*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22th of March 2018.

Santiago Sánchez Cortés

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 21st of March 2018.
- *Recent Advances in Plasmonic-Enhanced Raman Scattering and its applications in Molecular Detection and Biodiagnosis*. Materials Science and Engineering Department, University of California Los Angeles (EE.UU.), 7th of November 2018.

Carlos Cabrillo García

- *La física de la materia desordenada*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22th of March 2018.
- *Molim Workshop WG3 Ab-Initio Modelling of Molecular Processes Under Confinement (Organizer)* Madrid (Spain), 3rd-5th of December 2018.

M^a Vega Cañamares Arribas

- *Japanese woodblock prints: Surface Enhanced Raman Spectroscopy and Density Functional Theory analysis of safflower red*. The City College of New York, City University of New York, New York (EE.UU.), 6th of December 2018.

Ricardo Fernández Perea

- *MDANSE: Molecular Dynamics and Lattice Dynamics to Analyse Neutron Scattering Experiments*, Puerto de la Cruz, Tenerife (Spain), 24th -28th of September 2018.
- *Molim Workshop WG3 Ab-Initio Modelling of Molecular Processes Under Confinement (Organizer)*, Madrid (Spain), 3rd-5th of December 2018.

Vincenzo Giannini

- *Nanofotónica y metamateriales con nanoestructuras metálicas y semiconductoras*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio Histórico-Artístico*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: De las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, IEM, CSIC, Madrid, 20th-22nd of March 2018.

Enrique Nácher González

- *Física Nuclear (2): aplicaciones en física médica y astrofísica*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.
- *Física Nuclear experimental*, part of the “IFIC Summer Student Sessions 2018”, IFIC, Valencia, 9th-20th of July 2018.

Javier Díaz Ovejas

- *Frontiers in Nuclear and Hadronic Physics- FNHP2018, (attendance)*, Galileo Galilei Institute for Theoretical Physics, Florence (Italy), 26th of February-9th of March 2018.
- *Encuentro científico internacional en física nuclear. La Rábida 2018. Conceptos básicos en física nuclear: teoría, experimentos y aplicaciones (attendance)*, Universidad Internacional de Andalucía, 18th-22nd of June 2018.

Silvia Viñal i Onsès

- *Encuentro científico internacional en física nuclear. La Rábida 2018. Conceptos básicos en física nuclear: teoría, experimentos y aplicaciones (attendance)*, Universidad Internacional de Andalucía, 18th-22nd of June 2018.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**José Luis Doménech Martínez**

- *Espectroscopía infrarroja de iones de interés astrofísico*, “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

José M. Fernández Sánchez

- *El agua líquida más fría*, Ciclo oficial de coloquios IEM 2017-2018, Madrid, Spain, 15th of March 2018.
- *Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio*, part of the “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics. Part* “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Isabel Tanarro Onrubia

- *Plasma, el cuarto estado de la materia*, XVIII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 15th of November 2018.

Raúl Z. Martínez Torres

- *Espectroscopía Láser de Alta Resolución en Moléculas Ligeras. Part of “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.
- *Introducción a la Espectroscopía Raman Estimulada y otras Técnicas Raman Coherentes*. Invited conference in Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas of Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED). Madrid, Spain, 20th of November 2018.

Guzmán Tejeda Gala

- *Codirector del “XV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 20th - 22th of March 2018.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics. Part of “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Ramón J. Peláez Fuertes

- *Plasmas a baja temperatura*, “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Vicente Timón Salinero

- *Laboratorio de hielos y la modelización computacional de hielos y fases minerales*. “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

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

- *“Grandes instalaciones científicas: Un universo de posibilidades al servicio de la nanotecnología”* Escuela de verano de la Universidad Internacional Menéndez Pelayo: “Nanotecnología: Luces y sombras del control de la materia a escala atómica”. Santander (Spain), 23-27th of July 2018.
- *“El uso de Grandes Instalaciones Científicas en la investigación de la Materia Condensada Blanda”*, XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Aurora Nogales Ruiz

- *“Introduction to dielectric relaxation Case study: performing ‘bulk’ experiments in nanoconfined systems”* 8th Laboratory Course On Dielectric Spectroscopy. 7th-11th of May 2018, San Sebastián – Spain

Patricia Enrique-Jiménez

- *Propiedades nanomecánicas en polímeros*, “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.

Edgar Gutiérrez Fernández

- *“Polímeros: nanoestructuración y aplicaciones”*, “XV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20th-22nd of March 2018.
- *“PEDOT:PSS thin films nanostructured by laser and its influence on its electrical properties”*, 3rd Young Polymer Scientist Seminar, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), 30th of October 2018.
- *“Nanostructuring of conducting polymer thin films by laser and its influence on its electrical properties”*, PhDay Físicas 2018, Facultad de Física (UCM), 21st-28th of November 2018.
- *“Nanostructuring of conducting polymer thin films by laser and its influence on its electrical properties”*, Jornadas de Doctorandos 2018-19, Sesión de Invierno, Facultad de Física (UCM), 10th-11th of December 2018.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS AWARDS

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

Jesús Fernando Barbero González

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *XXVII International Fall Workshop on Geometry and Physics*, Sevilla (Spain)

Guillermo Antonio Mena Marugán

- Member of the Editorial Board of the scientific journal *Universe*
- Review Editor in *Cosmology* of the scientific journal *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*

Maria Luisa Senent Diez

- 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

- Specialty Chief Editor of *Frontiers in Physics* and *Frontiers in Astronomy and Space Sciences, Cosmology* section
- Associate Editor of *Frontiers in Physics* and *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* (until August 2018)
- Editor of *ISRN Mathematical Physics*
- Guest Editor of the Special Issue “*Gravity, Black Holes and Cosmology XXI*” in *Universe (MDPI)* (ISSN 2218-1997)
- Reviewer of research proposals for the National Science Centre (Narodowe Centrum Nauki, NCN), Poland
- Organizer and webmaster of the cycle of theoretical-physics seminars “*De Madrid al Cosmos*”, <http://demadridalcosmos.csic.es>

Luis J. Garay Elizondo

- Member of the Local Organizing Committee of the Workshop *Pedro's universes* (Spain)

Juan Margalef Bentabol

- Winner of *FameLab Spain 2018*
- Finalist at the *international FameLab* contest 2018 (UK)
- Second prize at the 3MT in the UC3M contest.

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

M^a José García Borge

- Member of the International Advisory Committee of the *IV Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure* (Bornio, Italy, 2018)
- Member of the *Local Organising Committee* of the “International Conference on Electromagnetic Isotope Separators and Related Topics EMIS XVIII (CERN, Geneva, Switzerland, 2018)
- Coordinator of *Nuclear and Particle Physics* Subarea of the State Research Agency
- Member of the *Advisory Committee* of TRIUMF 2014-2019
- Member of the *Advisory Committee* of future projects of STFC (UK)
- Member of the *Scientific Advisory Committee* of GSI / Fair 2016-2019
- Member of the *Evaluated Committee* of the IRFU, CEA, for HCERES
- Member of the P2 Panel of *ERC Advance Grants*

Francisco Javier Bermejo Barrera

- Member of the *Editorial Board of the Physical Review Letters* (Divisional Associate Editor in Condensed Matter Physics)
- Member of *Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FAP5)* of the *ISIS Pulsed Neutron & Muon Source*

Olof Tengblad

- Spanish Representative of the 82nd Meeting of the ISOLDE Collaboration Committee, CERN (Switzerland), 26th of June 2018
- GENCO Award 2018

José Antonio Sánchez Gil

- OSA Optics Express Associate Editor (since August)
- Guest Editor: AIP Journal of Applied Physics Special Topic on "Dielectric Nanoresonators and Metamaterials", September 2018-March 2019
- Coorganizer of the workshop *Light Magnetolectric Effects on nanostructures* (LIMAGE), Donostia-San Sebastián (Spain), 7th -9th of February 2018
- Session co-organizer: Nanofotónica, *Reunión Nacional de Óptica* 2018, Castellón (Spain), 3th-6th of July 2018

M^a Vega Cañamares Arribas

- Secretary/Treasure of the *Spectroscopy Comitee of the Spanish Optical Society* (Spain)

Ricardo Fernández Perea

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

Sagrario Martínez Ramírez

- Member of the Scientific Committee of *VI Foro Internacional de la Cal*, Pamplona (Spain)

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS**Dionisio Bermejo Plaza**

- 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*

Salvador Montero Martín

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

Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones* (ASEVA) (Spain)
- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications* (IUVSTA)
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases* (ESCAMPIG). From august 2018

José M. Fernández Sánchez

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

Isabel Tanarro Onrubia

- President of the board of the "*Grupo Especializado de Física de Plasmas*" of the *Real Sociedad Española de Física* (Spain) since June 2016
- Member of the *Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases* (ESCAMPIG). Period 2012-July 2018

Belén Maté Naya

- Secretary of the *Sociedad Española de Óptica- SEDOPTICA* (Spain) since 2017

Vicente Timón Salinero

- Member of the board of the *Sociedad Española de Mineralogía* (SEM) (Spain)

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS**Araceli Flores Aguilar-Amat**

- Member of the POLYCHAR Scientific Committee

Mari Cruz García Gutiérrez

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

Aurora Nogales Ruiz

- Member of college 9: "Soft Matter" of the "Institut Laue-Langevin" (ILL), since June 2016

Tiberio Ezquerro Sanz

- Member of the Beamtime Review Panel (BTRP) of the spanish synchrotron ALBA (www.cells.es). Since 2016
- Chairman of the Beamtime Review Panel (BTRP) committees of the spanish synchrotron ALBA. (www.cells.es). Since June 2018
- Member of the Scientific Advisory Committee (SAC), of the spanish synchrotron ALBA. Since June 2018
- Member of the editorial board of the scientific journal Polymers (MDPI). Since November 2018

Juan Francisco Vega Borrego

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of the 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

Jesús Fernando Barbero González

¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)

IES José Luis Sampedro, Tres Cantos, Madrid
13th of April 2018.

¿Qué es la relatividad?

IES José Luis Sampedro, Tres Cantos, Madrid
13th of April 2018.

Materiales Asombrosos

IES José Luis Sampedro, Tres Cantos, Madrid
13th of April 2018.

Materiales Asombrosos

IES Cañada Real, Galapagar, Madrid
31st of October 2018.

Explorando el sistema solar

IES Cañada Real, Galapagar, Madrid
31st of October 2018.

¡Menudos elementos! (todo lo que usted quiso saber sobre la tabla periódica pero nunca se atrevió a preguntar)

IES Cañada Real, Galapagar, Madrid
31st of October 2018.

Ondas, gravedad y ondas gravitatorias

Semana de la Ciencia en Gandía
5th of November 2018.

Las ondas: del sonido a los agujeros negros
 Semana de la Ciencia en Madrid
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 14th of November 2018 (file available at digital.csic).

Base 2, base 3, ..., base N: curiosidades de los sistemas de numeración
 Semana de la Ciencia en Madrid
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 14th of November 2018 (file available at digital.csic).

Guillermo A. Mena Marugán

Visit to the Main Campus of CSIC by Colegio Diocesano San Antón, from Badajoz.
 Organizer and coordinator of the activity.
 Speaker of the introductory conference.
 Instituto de Estructura de la Materia and Instituto de Óptica, CSIC, Madrid
 18th of December 2018.

Gianluca Calcagni

La Tierra es plana: Los misterios del universo para todos
 Semana de la Ciencia 2018
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 16th of November 2018.

Rafael Alejandro Molina Fernández

Nuevas tecnologías cuánticas: promesas y realidades
 Seminario - Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 6th of November 2018.

La física de la fotosíntesis
 Seminario – Aula de Humanidades de Guadarrama
 Ayuntamiento de Guadarrama
 20th of March 2018.

Luis J. Garay Elizondo

Espaciotiempo cuántico
 Máster OCDE
 Casa Club, Madrid
 2018

Agujeros negros y ondas gravitatorias
 Colegio Mayor Chaminade, Madrid
 2018

Álvaro Rubio García

La relatividad y la cuántica en nuestro día a día
 Seminario - Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 12th of November 2018.

Enrique Benito Matías

Energía y movimiento perpetuo
 Seminario - Semana de la Ciencia
 Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid
 12th of November 2018.

Juan Margalef Bentabol

¿Qué pinta la topología en la Alhambra?
 Seminario Junior IGM
 Leganés
 9th of February 2018.

Grafos, ¡hasta en la pizza!
T3chFest
Leganés
23rd of February 2018.

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

Santiago Sánchez Cortés

Asistencia a la International Fair “Analytica 2018”.
Munich, Germany.
10th-13th of April 2018.

Sagrario Martínez Ramírez

Charla: “Grandes mujeres científicas en la historia: Rita Levi-Montalcini (Neurobióloga) y Rosalind Franklin (Química cristalógrafa)”.

Charla: “Las mujeres científicas de hoy y en tu barrio”.

Debate: ¿Qué dicen las encuestas sobre las carreras que escogen chicos y chicas?, ¿Te atreves a ser científica?

Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia.

IES Ramiro de Maeztu de Madrid.

9th of February 2018.

Programa Educativo 4º ESO+Empresa.

Colaboración con centros educativos.

Comunidad de Madrid.

19th-21st of April 2018.

Coloquio “Marie Sklodowska Curie”.

Organización de Conferencias.

17th October-11th November 2018.

Taller “La Química del yeso”.

XIV Semana de la Ciencia-CSIC-CAM.

IES San Fernando, Madrid, Spain.

7th of November 2018.

Taller “La Química del yeso”.

XV Semana de la Ciencia-CSIC-CAM.

Colegio San Gabriel, Madrid, Spain.

13th of November 2018.

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”.

XV Semana de la Ciencia-CSIC-CAM.

CP Reina Victoria, Madrid, Spain.

13th of November 2018.

Visitas guiadas al Instituto de Estructura de la Materia e Instituto de Óptica.

Proyecto *Fisicart*.

Colegio Diocesano San Antón de Badajoz.

15th of December 2018.

Enrique Nácher González

Charla: “Introducción a la Física Nuclear”.

Programa: El CPAN en el Instituto.

IES “Cid Campeador”, Valencia, Spain.

22nd of January 2018.

Visita guiada para estudiantes de bachillerato al IFIC.

Programa: Visitas guiadas.

IES “Els Évols de l’Alcúdia y del Colegio La Devesa de Carle”, Valencia, Spain.

12th of March 2018.

Visita guiada para estudiantes de bachillerato al IFIC.
 Programa: Visitas guiadas.
 IES “IES Serra Mariola de Muro”, Alcoy, Alicante, Spain.
 8th of May 2018.

Visita guiada para estudiantes al IFIC.
 Programa: Visitas guiadas.
 Colegio Pureza de Maria-Cid, Valencia, Spain.
 11th of June 2018.

Diego Romero Abujetas

Actor in “[Ciencia]⁴ pared” (Dramaturgia y dirección: José Vicente García Ramos)
 Scientific theater – TeatrIEM.

- 2nd of February 2018. Teatro del Centro Cívico “Los Pinos”, Alcorcón, Madrid.
- 6th of April 2018. Instituto de Enseñanza Secundaria Margarita Salas, Majadahonda, Madrid.
- 15th of April 2018. Residencia de Estudiantes, Madrid.
- 14th of July 2018. Fundación Olivar de Castillejo-C/Menéndez Pidal 3bis, Madrid.

Taller: “Ciudad Ciencia”.
 Charla: *Descubriendo la luz*.
 Mota del Cuervo, Cuenca, Spain.
 2nd of May 2018.

Blog divulgativo “IOSA OSA-EPS Student Chapter”.
 Título: *Myopia @ the Royal Botanical Garden*.
<http://iosastudentchapter.osahost.org/myopia-the-royal-botanical-garden/>
 30th of October 2018.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo.
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia.
 Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
 14th of November 2018.

Vicente Timón Salinero

Desafiando a la fuerza de la gravedad de Newton.
 Divulgación científica. Taller de experimentos caseros dirigido a estudiantes de 5º y 6º de primaria.
 Ámbito: Regional Comunidad de Madrid.
 November of 2018.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Mari Cruz García Gutiérrez

Actress in “A Ciencia cierta”.
 Scientific theater – TeatrIEM.
 Semana de la Ciencia -Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, José Abascal 9, Madrid.
 15th-17th of November 2018.

Actress in “[Ciencia]⁴ pared” (Dramaturgia y dirección: José Vicente García Ramos)
 Scientific theater – TeatrIEM.

- 2nd of February 2018. Teatro del Centro Cívico “Los Pinos”, Alcorcón, Madrid.
- 6th of April 2018. Instituto de Enseñanza Secundaria Margarita Salas, Majadahonda, Madrid.
- 15th of April 2018. Residencia de Estudiantes, Madrid.
- 14th of July 2018. Fundación Olivar de Castillejo-C/Menéndez Pidal 3bis, Madrid.

Interview in radio “El teatro como divulgación científica”. Scientific theater – TeatrIEM.
 9th of May 2018. Einstein en Malasaña2 de Radio M21.

Tiberio Ezquerro Sanz

Actor in “A Ciencia cierta”.

Scientific theater – TeatrIEM.

Semana de la Ciencia -Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, José Abascal 9, Madrid.

15th-17th of November 2018.

Actor in “[Ciencia]⁴ pared” (Dramaturgia y dirección: José Vicente García Ramos)

Scientific theater – TeatrIEM.

- 2nd of February 2018. Teatro del Centro Cívico “Los Pinos”, Alcorcón, Madrid.

- 6th of April 2018. Instituto de Enseñanza Secundaria Margarita Salas, Majadahonda, Madrid.

- 15th of April 2018. Residencia de Estudiantes, Madrid.

- 14th of July 2018. Fundación Olivar de Castillejo-C/Menéndez Pidal 3bis, Madrid.

Aurora Nogales Ruiz

Conference and Activity ‘¿Te atreves a ser científica?’.

IES Ramiro de Maeztu.

9th of February 2018.

Community manager of the twitter account of the SoftMatPol Grup (@softmatpol).

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Bratislava, Slovak Republic.

Date: 17th-21st of June, 24th-28th of November 2018

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Videoconference.

Date: During all the 2018 year, twice a month.

➤ MIEMBROS DE COMITÉS CIENTÍFICOS ASESORES

Member: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Regulaxis SAS Company.**

Place: Technological Park in Paris, France.

Date: 2018

➤ INFORMES DE TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA

Sagrario Martínez Ramírez.

Análisis De Pinturas.

Mafre Familiar S.A.

Date: October 2018

➤ SOLICITUDES DE PATENTES

Santiago Sánchez Cortés.

Type: Patente de invención.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Application Number: PCT/IB18/060065.

Date: 13th of December 2018

Title: Structure of the Nano-optical Chip for the Detention of Substances/molecules in the Environment, Food, and Biological System.

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

➤ REUNIONES DE TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Meeting attendees: Javier Martínez-Salazar y Juan Francisco Vega.

Collaboration: **Dow Chemical Ibérica.**

Place: Sede de Dow Chemical en Tarragona.

Date: 10th-11th of July 2018.

➤ INFORMES DE TRANSFERENCIA TECNOLÓGICA

There have been the corresponding confidential reports in order to cover the objectives of the project.

There have been other technical contacts through various communications channels.

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 de Madrid.*

Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

María Luisa Senent Diez.

- *Research group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN), University of Huelva.*

Responsible: Miguel Carvajal Zaera

Otras actividades / Other activities:

Gianluca Calcagni.

- Associate Member of the LISA Cosmology Working Group and LISA Fundamental Physics Working Group.

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 Málaga.*

Responsible: Juan Carlos Otero

Desestimada la renovación por Resolución de fecha 10 de diciembre de 2018.

Otras actividades / Other activities:

Sagrario Martínez Ramírez.

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

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga.

- *Molecular Physical Chemistry*, comprising IEM-CSIC, IQFR-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I, Universidad Complutense de Madrid.
Responsible: F. Javier Aoiz

Otras actividades / Other activities:

Dionisio Bermejo Plaza.

- Groupe de recherche international (GDRI), HiResMIR (High Resolution Microwave), Infrared and Raman molecular spectroscopy for atmospheric, planetologic and astrophysical applications.

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

María José Capitán Aranda.

- *Física de Sistemas Crecidos con Baja Dimensionalidad*, Universidad Autónoma de Madrid.
Responsible: Jesús Álvarez Alonso

Otras actividades / Other activities:

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 1st-5th of March 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 27th of June-2nd of July 2018.
- Measurements in Petra Synchrotron, (PO3 beamline). Hamburg, Germany, 4th-5th of October 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 5th-9th of December 2018.

Tiberio Ezquerro Sanz.

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 1st-5th of March 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 27th of June-2nd of July 2018.
- Measurements in Petra Synchrotron, (PO3 beamline). Hamburg, Germany, 4th-5th of October 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 5th-9th of December 2018.

Aurora Nogales Ruiz.

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 29th-31st of January 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 5th-9th of December 2018.

Edgar Gutiérrez Fernández.

- Measurements in the Elettra Synchrotron, (beamline SAXS). Trieste, Italy, 29th-31st of January 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 27th of June-2nd of July 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 17th-21st of September 2018.
- Measurements in ALBA Synchrotron, (NCD beamline). Barcelona, Spain, 5th-9th of December 2018.

CAPÍTULO 6

**PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA**

CHAPTER 6

PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC PRODUCTION

6.1 PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI ISI PUBLICATIONS

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

1. A. Addazi, G. Calcagni, and A. Marcianò.
New Standard Model constraints on the scales and dimension of spacetime.
Journal of High Energy Physics **12**, 130 (2018).
2. D. R. Alcoba, P. Capuzzi, A. Rubio-García, J. Dukelsky, G. E. Massacesi, O. B. Oña, A. Torre, and L. Lain.
Variational reduced density matrix method in the doubly occupied configuration interaction space using three-particle N -representability conditions.
The Journal of Chemical Physics **149**, 194105 (2018).
3. A.N. Antonov, D.N. Kadrev, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Temperature dependence of the volume and surface contributions to the nuclear symmetry energy within the coherent density fluctuation model.
Physical Review C **98**, 054315 (2018).
4. A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, D. N. Kadrev, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Symmetry Energy and Its Components in Finite Nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **1023**, 012014 (2018).
5. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, and Eduardo J. S. Villaseñor.
On the distribution of the eigenvalues of the area operator in loop quantum gravity.
Classical and Quantum Gravity **35**, 065008 (2018).
6. J. Fernando Barbero G., Antonio Ferreira, José Navarro Salas, and Eduardo J. S. Villaseñor.
Adiabatic expansions for Dirac fields, renormalization, and anomalies.
Physical Review D **98**, 025016 (2018).
7. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Absence of cosmological constant problem in special relativistic field theory of gravity.
Annals of Physics **398**, 9 (2018).
8. L. Bytautas and J. Dukelsky.
Seniority based energy renormalization group (Ω -ERG) approach in quantum chemistry: Initial formulation and application to potential energy surfaces.
Computation and Theoretical Chemistry **1141**, 74 (2018).
9. C. Cabezas, I. Kleiner, M. Carvajal, and Y. Endo.
Probing the methyl torsional barriers of the doubly substituted methyl-ethyl Criegee intermediate by FTMW spectroscopy.
Journal of Molecular Spectroscopy **353**, 23 (2018).
10. G. Calcagni.
The geometry of learning.
Journal of Mathematical Psychology **84**, 74-88 (2018).
11. G. Calcagni.
Towards multifractional calculus.
Frontiers in Physics **6**, 58 (2018).
12. G. Calcagni, L. Modesto, and G. Nardelli.
Initial conditions and degrees of freedom of non-local gravity.
JHEP **05**, 087 (2018).
13. G. Calcagni, L. Modesto, and Y.-S. Myung.
Black-hole stability in non-local gravity.
Physics Letters B **783**, 19 (2018).

14. G. Calcagni.
Taming the beast: diffusion method in nonlocal gravity.
Universe **04**, 95 (2018).
15. J.A.R. Cembranos, S.E.R. Ciarreta, and L.J. Garay.
Scale Holography.
European Physical Journal C **78**, 732 (2018).
16. E.R. Christensen, A.S. Jensen, and E. Garrido.
Efimov states of three unequal bosons in non-integer dimensions.
Few-body Systems **59**, 136 (2018).
17. J. de Ramón, L.J. Garay, and E. Martín-Martínez.
Direct measurement of the two-point function in quantum fields.
Physical Review D **98**, 105011 (2018).
18. B. Elizaga Navascués, D. Martín-de Blas, and G.A. Mena Marugán.
The Vacuum State of Primordial Fluctuations in Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Universe **04**, 0098 (2018).
19. B. Elizaga Navascués, D. Martín de Blas, and G.A. Mena Marugán.
Time-dependent Mass of Cosmological Perturbations in the Hybrid and Dressed Metric Approaches to Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **97**, 043523 (2018).
20. B. Elizaga Navascués and G.A. Mena Marugán.
Perturbations in Quantum Cosmology: The Continuum Limit in Fourier Space.
Physical Review D **98**, 103522 (2018).
21. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, and S. Prado Loy.
Backreaction of Fermionic Perturbations in the Hamiltonian of Hybrid Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D **98**, 063535 (2018).
22. C. García Izquierdo, A. García-Benadí, P. Corredera, S. Hernández, A. González Calvo, J. del Río Fernández, M. Nogueres-Cervera, C. Pulido de Torres, and D. del Campo.
Traceable sea water temperature measurements performed by optical fibers.
Measurement: Journal of the International Measurement Confederation **127**, 124-133 (2018).
23. A. García Vela, L. Bañarés and M.L. Senent.
Dynamic of Molecular Systems.
European Physical Journal D **72**, 97 (2018).
24. J. E. García-Ramos, J. Dukelsky, P. Pérez-Fernández, and J.M. Arias.
Phase diagram of an extended Agassi model.
Physical Review C **95**, 064306 (2018).
25. E. Garrido.
Few-body techniques using coordinate space for bound and continuum states.
Few-body Systems **59**, 17 (2018).
26. D. Hove, E. Garrido, P. Sarriguren, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, A. S. Jensen, and N. T. Zinner.
Emergence of Clusters: Halos, Efimov States, and Experimental Signals.
Physical Review Letters **120**, 052502 (2018).
27. D. Hove, E. Garrido, A.S. Jensen, P. Sarriguren, H.O.U. Fynbo, D.V. Fedorov, and N. T. Zinner.
Two-proton capture on the ^{68}Se nucleus with a new selfconsistent cluster model.
Physics Letters B **782**, 42 (2018).
28. D. Hove, E. Garrido, P. Sarriguren, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo, A.S. Jensen, and N. T. Zinner.
Combined few-body and mean-field model for nuclei.
Journal of Physics G: Nucl. Part. Phys. **45**, 073001 (2018).

29. J.P. Lv, Y. Deng, J.L. Jacobsen, J. Salas, and A.D. Sokal.
Duality and the universality class of the three-state Potts antiferromagnet on plane quadrangulations
Physical Review E **97**, 4 (2018).
30. J.P. Lv, Y. Deng, J.L. Jacobsen, and J. Salas.
The three-state Potts antiferromagnet on plane quadrangulations.
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **51**, 365001 (2018).
31. R.A. Molina and J. González.
Surface and 3D Quantum Hall Effects from Engineering of Exceptional Points in Nodal Line Semimetals.
Physical Review Letters **120**, 146601 (2018).
32. R.A. Motiyenko, L. Margulès, M.L. Senent and J.C. Guillemin.
Internal rotation of OH group in 4-hydroxy-2-butyne nitrile studied by millimeter-wave spectroscopy.
Journal of Physical Chemistry A **122**, 3163 (2018).
33. L. Muñoz, R.A. Molina, and J.M.G. Gómez.
Chaos in nuclei: theory and experiment.
Journal of Physics: Conference Series **1023**, 012011 (2018).
34. L. Muñoz, R.A. Molina, J.M.G. Gómez, and A. Heusler.
Experimental evidence of chaos in the bound states of 208Pb.
Journal of Physics: Conference Series **966**, 012060 (2018).
35. J. Mur-Petit, A. Relaño, R. A. Molina, and D. Jaksch.
Revealing missing charges with generalised quantum fluctuation relations.
Nature Communications **9**, 2006 (2018).
36. L.A. Oliveira, L.J. Garay, and L.C.B. Crispino.
Ergoregion instability of a rotating quantum system.
Physical Review D **97**, 124063 (2018).
37. A. Rubio-García and J. J. García-Ripoll.
Topological phases in the Haldane model with spin-spin on-site interactions.
New Journal of Physics **20**, 043033 (2018).
38. A. Rubio-García, D. R. Alcoba, P. Capuzzi, and J. Dukelsky.
Benchmarking the Variational Reduced Density Matrix Theory in the Doubly Occupied Configuration Interaction Space with Integrable Pairing Models.
Journal of Chemical Theory and Computation **14**, 4183 (2018).
39. M.A. Salchi, M.T. Yamashita, M.R. Hadizadeh, E. Garrido, L. Tomio, and T. Frederico.
Probing Efimov discrete scaling in an atom-molecule collision.
Physical Review A **97**, 012701 (2018).
40. P. Sarriguren, A. Algora, and G. Kiss.
Beta-decay properties of neutron-rich Ca, Ti, and Cr isotopes.
Physical Review C **98**, 024311 (2018).
41. P. Sarriguren.
Weak-interaction rates in stellar conditions.
Journal of Physics: Conference Series **1023**, 012002 (2018).
42. M.L. Senent.
Large amplitude motions of methylamine from the perspective of the highly correlated ab initio methods.
Journal of Molecular Spectroscopy **343**, 28 (2018).

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

43. D. R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, and J. A. Sánchez-Gil.
Impedance-matched, double-zero optical metamaterials based on weakly resonant metal oxide nanowires.
Photonics **5**, 7 (2018).
44. D. R. Abujetas, J. A. Sánchez-Gil, and J. J. Sáenz.
Generalized Brewster effect in high-refractive-index nanorod-based metasurfaces.
Optics Express **26**, 31523-31541 (2018).
45. I. Arribas, I. Vegas, V. García, R. Vigil de la Villa, S. Martínez-Ramírez, and M. Frías.
The deterioration and environmental impact of binary cements containing thermally activated coal mining waste due to calcium leaching.
Journal of Cleaner Production **183**, 887-897 (2018).
46. L. Atar, S. Paschalis, C. Barbieri, C. A. Bertulani, P. Díaz Fernández, M. Holl, M. A. Najafi, V. Panin, H. Alvarez-Pol, T. Aumann, V. Avdeichikov, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, J. M. Boillos, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Caamaño, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, M. Chartier, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, E. Cravo, R. Crespo, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estrade, F. Farinon, L. M. Fraile, M. Freer, D. Galaviz Redondo, H. Geissel, R. Gernhäuser, P. Golubev, K. Göbel, J. Hagdahl, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, A. Hufnagel, A. Ignatov, H. T. Johansson, B. Jonson, J. Kahlbow, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, A. Knyazev, T. Kröll, N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, S. Lindberg, J. Machado, J. Marganec-Galazka, A. Movsesyan, E. Nacher, E. Y. Nikolskii, T. Nilsson, C. Nociforo, A. Perea, M. Petri, S. Pietri, R. Plag, R. Reifarh, G. Ribeiro, C. Rigollet, D. M. Rossi, M. Röder, D. Savran, H. Scheit, H. Simon, O. Sorlin, I. Syndikus, J. T. Taylor, O. Tengblad, R. Thies, Y. Togano, M. Vandebrouck, P. Velho, V. Volkov, A. Wagner, F. Wamers, H. Weick, C. Wheldon, G. L. Wilson, J. S. Winfield, P. Woods, D. Yakorev, M. Zhukov, A. Zilges and K. Zuber.
Quasifree (p , $2p$) Reactions on Oxygen Isotopes: Observation of Isospin Independence of the Reduced Single-Particle Strength.
Physical Review Letters **120** (5), 052501(2018).
47. R. Berte, C. R. Gubbin, V. D. Wheeler, A. J. Giles, V. Giannini, S. A. Maier, S. De Liberato and J. D. Caldwell.
Sub-nanometer thin oxide film sensing with localized surface phonon polaritons.
ACS Photonics **5**(7), 2807-2815 (2018).
48. G. Benzoni, R. Lică, M.J.G. Borge and L.M. Fraile.
 β -decay properties in the Cs decay chain.
Journal of Physics: Conference Series **966**(1), 012024 (2018).
49. M. J. G. Borge.
Recent Results from ISOLDE and HIE-ISOLDE.
IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series **966**, 012002 (2018).
50. M.J.G. Borge and K. Blaum.
Focus on Exotic Beams at ISOLDE: A Laboratory Portrait.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **45**(1), 010301 (2018).
51. P. M. Carmona-Quiroga, S. Martínez-Ramírez and H. A. Viles.
Efficiency and durability of a self-cleaning coating on concrete and stones under both natural and artificial ageing trials.
Applied Surface Science **433**, 312 (2018).
52. D. Ciofini, M. Oujja, M.V. Cañamares, S. Siano and M. Castillejo.
Detecting molecular changes in UV laser-ablated oil/diterpenoid resin coatings using micro-Raman spectroscopy and Laser Induced Fluorescence.
Microchemical Journal **141**, 12 (2018).
53. E. Corda, M. Hernández, S. Sánchez-Cortés and P. Sevilla.
Cucurbit[n]urils ($n=6-8$) used as host molecules on supramolecular complexes formed with two different drugs: Emodin and Indomethacin.
Colloids and Surfaces A-Physicochemical and Engineering Aspects, **557**, 66-75 (2018).

54. A. Corsi, A. Obertelli, P. Doornenbal, F. Nowacki, H. Sagawa, Y. Tanimura, N. Aoi, H. Baba, P. Bednarczyk, S. Boissinot, M. Ciemala, A. Gillibert, T. Isobe, A. Jungclaus, V. Lapoux, J. Lee, K. Matsui, M. Matsushita, T. Motobayashi, D. Nishimura, S. Ota, E. Pollacco, H. Sakurai, C. Santamaria, Y. Shiga, D. Sohler, D. Steppenbeck, S. Takeuchi, R. Taniuchi and H. Wang.
Spectroscopy of nuclei around ^{100}Sn populated via two-neutron knockout reactions.
Physical Review C **97**, 044321 (2018).
55. M. P. de Lara-Castells, C. Cabrillo, D. A. Micha, A. O. Mitushchenko and T. Vazhappily.
Ab initio design of light absorption through silver atomic cluster decoration of TiO_2 .
Physical Chemistry Chemical Physics **20** (28), 19110-19119 (2018).
56. C. Delafosse, D. Verney, P. Marevic, A. Gottardo, C. Michelagnoli, A. Lemasson, A. Goasduff, J. Ljungvall, E. Clement, A. Korichi, G. De Angelis, C. Andreoiu, M. Babo, A. Boso, F. Didierjean, J. Dudouet, S. Franchoo, A. Gadea, G. Georgiev, F. Ibrahim, B. Jacquot, T. Konstantinopoulos, S. M. Lenzi, G. Maquart, I. Matea, D. Mengoni, D. R. Napoli, T. Niksic, L. Olivier, R.M. Perez-Vidal, C. Portail, F. Recchia, N. Redon, M. Siciliano, I. Stefan, O. Stezowski, D. Vretenar, M. Zielinska, D. Barrientos, G. Benzoni, B. Birkenbach, A. J. Boston, H. C. Boston, B. Cederwall, L. Charles, M. Ciemala, J. Collado, D. M. Cullen, P. Desesquelles, G. de France, C. Domingo-Pardo, J. Eberth, V. Gonzalez, L. J. Harkness-Brennan, H. Hess, D. S. Judson, A. Jungclaus, W. Korten, A. Lefevre, F. Legruel, R. Menegazzo, B. Million, J. Nyberg, B. Quintana, D. Ralet, P. Reiter, F. Saillant, E. Sanchis, Ch. Theisen and J. J. Valiente Dobon.
Pseudospin Symmetry and Microscopic Origin of Shape Coexistence in the ^{78}Ni Region: A Hint from Lifetime Measurements.
Physical Review Letters **121**, 192502 (2018).
57. M. Di Foggia, S. Ottani, A. Torreggiani, A. Zamuner, M. Dettin, S. Sanchez-Cortés, D. Cesini and A. Tinti.
Surface Enhanced Raman Scattering and Quantum-Mechanical Calculations on Self-Assembling Oligopeptides.
Journal of Raman Spectroscopy **49**, 982-996 (2018).
58. A. Di Pietro, J. P. Fernández-García, F. Ferrera, P. Figuera, M. Fisichella, M. Lattuada, S. Marletta, C. Marchetta, D. Torresi, M. Alcorta, M. J. G. Borge, T. Davinson, S. Heinitz, A. M. Laird, A. C. Shotter, D. Schumann, N. Soic, O. Tengblad, and M. Zadro.
Experimental investigation of exotic clustering in B-13 and C-14 using the resonance scattering method.
IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series **966**, 012040 (2018).
59. P. Díaz Fernández, H. Alvarez-Pol, R. Crespo, E. Cravo, L. Atar, A. Deltuva, T. Aumann, V. Avdeichikov, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, J. M. Boillos, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Caamaño, P. Cabanelas, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkäll, M. Chartier, L. V. Chulkov, D. Cortina-Gil, U. Datta Pramanik, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estradé, F. Farinon, B. Fernández-Domínguez, L. M. Fraile, M. Freer, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhäuser, P. Golubev, K. Göbel, J. Hagdahl, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, M. Holl, A. Hufnagel, A. Ignatov, H. T. Johansson, B. Jonson, D. Jurciukonis, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, A. Knyazev, T. Kröll, N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, S. Lindberg, J. Machado, J. Marganec, A. M. Moro, A. Movsesyan, E. Nacher, A. Najafi, E. Nikolskii, T. Nilsson, C. Nociforo, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, M. Petri, B. Pietras, S. Pietri, R. Plag, R. Reifarth, G. Ribeiro, C. Rigollet, D. Rossi, M. Röder, D. Savran, H. Scheit, H. Simon, O. Sorlin, I. Syndikus, J. T. Taylor, O. Tengblad, R. Thies, Y. Togano, M. Vandebrouck, P. Velho, V. Volkov, A. Wagner, F. Wamers, H. Weick, C. Wheldon, G. Wilson, J. S. Winfield, P. Woods, D. Yakorev, M. Zhukov, A. Zilges, K. Zuber and R3B Collaboration.
Quasifree (p, pN) scattering of light neutron-rich nuclei near $N=14$.
Physical Review C **97** (2), 024311 (2018).
60. J. M. Fitzgerald and V. Giannini.
Battling retardation and nonlocality: The hunt for the ultimate plasmonic cascade nanolens.
ACS Photonics, **5**(6), 2459-2467 (2018).
61. M. Frías, R. Vigil De La Villa, R. García, S. Martínez-Ramírez and L. Fernández-Carrasco.
New developments in low clinker cement paste mineralogy.
Applied Clay Science **166**, 94 (2018).
62. M. Frías, R. Vigil De La Villa, R. García, O. Rodríguez, L. Fernández-Carrasco and S. Martínez-Ramírez.
Carbonation-induced microstructural changes in coal mining waste blended cement pastes and its influence on mechanical and microporosity properties.
Minerals **8**, 169 (2018).

63. M. Frías, R. Vigil De La Villa, R. García, O. Rodríguez, L. Fernández-Carrasco, S. Martínez-Ramírez, E. Villar and I. Vegas.
Effect of a high content in activated carbon waste on low clinker cement microstructure and properties.
Construction and Building materials **184**, 11 (2018).
64. R. García, R. Vigil, M. Frías, S. Martínez Ramírez, I. Vegas and L. Fernández.
Cements based on kaolinite waste.
Advances in Geosciences **45**, 133-138 (2018).
65. R. García-Giménez, R. Vigil De La Villa, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco and M. Frías.
Influence of ZnO on the activation of kaolinite-based coal waste: Pozzolan activity and mineralogy in the pozzolan/lime system.
Applied Clay Science **156**, 202 (2018).
66. R. García-Giménez, M. Frías, R. Vigil De La Villa and S. Martínez-Ramírez.
Ca/Si and Si/Al Ratios of Metakaolinite-Based Wastes: Their Influence on Mineralogy and Mechanical Strengths.
Applied Sciences **8**, 480 (2018).
67. R. Garg, C. Barton, C. Aa Diget, S. Courtin, G. Fruet, H.U. Fynbo, A. Howard, A. Illana, D. G. Jenkins, I. Marroquin, S. Kirsebom, M. V. Lund, I. Moore, A. Perea, J. Refsgaard, J. E. Riley, S. Rinta-Antila, L. Sinclair, O. Tengblad and The IGISOL Collaboration.
Rotational excitation of the Hoyle state in C-12.
IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series **940**, 012043 (2018).
68. V. Guadilla, J. L. Tain, A. Algora, J. Agramunt, J. Äystö, J.A. Briz, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallo, L.M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, L. Le Meur, T. Martinez, M. Monserrate, A. Montaner-Pizá, I. Moore, E. Nacher, S.E.A. Orrigo, H. Penttilä, I. Pohjalainen, A. Porta, J. Reinikainen, M. Reponen, S. Rice, S. Rinta-Antila, B. Rubio, K. Rytönen, T. Shiba, V. Sonnenschein, A. A. Sonzogni, E. Valencia, V. Vedia, A. Voss, J. N. Wilson, and A.-A. Zakari-Issoufou.
Characterization and performance of the DTAS detector.
Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A **910**, 79-89 (2018).
69. K. Hadyńska-Klek, P. J. Napiorkowski, M. Zielińska, J. Srebrny, A. Maj, F. Azaiez, J. J. Valiente Dobón, M. Kicińska-Habior, F. Nowacki, H. Naïdja, B. Bounthong, T. R. Rodríguez, G. de Angelis, T. Abraham, G. Anil Kumar, D. Bazzacco, M. Bellato, D. Bortolato, P. Bednarczyk, G. Benzoni, L. Berti, B. Birkenbach, B. Bruyneel, S. Brambilla, F. Camera, J. Chavas, B. Cederwall, L. Charles, M. Ciemała, P. Cocconi, P. Coleman-Smith, A. Colombo, A. Corsi, F. C. L. Crespi, D. M. Cullen, A. Czermak, P. Désesquelles, D. T. Doherty, B. Dulny, J. Eberth, E. Farnea, B. Fornal, S. Franchoo, A. Gadea, A. Giaz, A. Gottardo, X. Grave, J. Grzebosz, A. Görgen, M. Gulmini, T. Habermann, H. Hess, R. Isocrate, J. Iwanicki, G. Jaworski, D. S. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, M. Kmiecik, D. Karpiński et al.
Quadrupole collectivity in ⁴²Ca from low-energy Coulomb excitation with AGATA.
Physical Review C **97**, 024326 (2018).
70. C. Henrich, Th. Kröll, K. Arnsward, C. Berger, C. Berner, T. Berry, V. Bildstein, J. Cederkäll, D. Cox, G. de Angelis, H. De Witte, G. Fernández Martínez, L. Gaffney, G. Georgiev, S. Ilieva, A. Illana Sisón, R. Lozeva, M. Matejska-Minda, P. J. Napiorkowski, J. Ojala, J. Pakarinen, G. Rainovski, M. Ramdhane, P. Reiter, H. -B. Rhee, D. Rosiak, M. Seidlitz, B. Siebeck, G. Simpson, J. Snäll, V. Vaquero Soto, M. Thürauf, M. von Schmid, N. Warr, L. Werner and M. Zielińska.
Coulomb excitation of ¹⁴²Xe.
Acta Physica Polonica B **49**(3), 529 (2018).
71. B. Hernández, Y.-M. Coïc, E. López-Tobar, S. Sánchez-Cortés, B. Barón, F. Pflüger, S. G. Kruglik, R. Cohen, and M. Ghomil.
Dynamical Behavior of Somatostatin-14 and its Cyclic Analogues as Analyzed in Bulk and on Plasmonic Silver Nanoparticles.
Advances in Protein Chemistry and Structural Biology **112**, 81-121 (2018).
72. B. Hernández, L. Tinacci, Y.-M. Coïc, A. Chenal, R. Cohen, S. Sánchez-Cortés and M. Ghomi.
Tryptophan Tight Binding to Gold Nanoparticles Induces Drastic Changes in Indole Ring Raman Markers.
Journal of Physical Chemistry C **122**, 13034 (2018).

73. A.M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, T. Pintado, P. Carmona, and F. Jiménez-Colmenero.
Elucidation of lipid structural characteristics of chia oil emulsion gels by Raman spectroscopy and their relationship with technological properties.
Food Hydrocolloids **77**, 2012-2019 (2018).
74. J. Hu, D. R. Abujetas, D. Tsoutsis, L. Leggio, F. Rivero, E. Martín Rodríguez, R. Aguilar Torres, J. A. Sánchez-Gil, H. Loro Ramírez, D. Gallego, H. Lamela Rivera, P. Rivera Gil, F. Alfonso, J. García Solé, and D. Jaque.
Invited article: Experimental evaluation of gold nanoparticles as infrared scatterers for advanced cardiovascular optical imaging.
APL Photonics **3**, 080803 (2018).
75. N. Husillos-Rodríguez, P. M. Carmona-Quiroga, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela and R. Fort.
Sacrificial mortars for surface desalination.
Construction and Building materials **173**, 452 (2018).
76. L. Kaya, A. Vogt, P. Reiter, C. Muller-Gatermann, M. Siciliano, L. Coraggio, N. Itaco, A. Gargano, K. Arnsward, D. Bazzacco, B. Birkenbach, A. Blazhev, A. Bracco, B. Bruyneel, L. Corradi, F. C. L. Crespi, G. de Angelis, M. Droste, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, A. Gadea, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, H. Hess, R. Hetzenegger, R. Hirsch, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, W. Korten, S. Leoni, L. Lewandowski, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, G. Montagnoli, D. Montanari, D. Napoli, Zs. Podolyak, G. Pollarolo, F. Recchia, D. Rosiak, N. Saed-Samii, E. Sahin, F. Scarlassara, M. Seidlitz, P. -A. Soderstrom, A.M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, B. Szpak, C. Ur, J. J. Valiente-Dobon, M. Weinert, K. Wolf and K. O. Zell.
Millisecond $23/2^+$ isomers in the $N=79$ isotones ^{133}Xe and ^{135}Ba .
Phys. Rev. C **98**, 054312 (2018).
77. L. Kaya, A. Vogt, P. Reiter, M. Siciliano, B. Birkenbach, A. Blazhev, L. Coraggio, E. Teruya, N. Yoshinaga, K. Higashiyama, K. Arnsward, D. Bazzacco, A. Bracco, B. Bruyneel, L. Corradi, F.C.L. Crespi, G. de Angelis, J. Eberth, E. Farnea, E. Fioretto, C. Fransen, B. Fu, A. Gadea, A. Gargano, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, K. Hadynska-Klek, H. Hess, R. Hetzenegger, R. Hirsch, N. Itaco, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, W. Korten, S. Leoni, L. Lewandowski, S. Lunardi, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, G. Montagnoli, D. Montanari, C. Muller-Gatermann, D. Napoli, Zs. Podolyak, G. Pollarolo, A. Pullia, M. Queiser, F. Recchia, D. Rosiak, N. Saed-Samii, E. Sahin, F. Scarlassara, D. Schneiders, M. Seidlitz, B. Siebeck, J. F. Smith, P. -A. Soderstrom, A. M. Stefanini, T. Steinbach, O. Stezowski, S. Szilner, B. Szpak, C. Ur, J. J. Valiente-Dobon, K. Wolf and K. O. Zell.
High-spin structure in the transitional nucleus ^{131}Xe : Competitive neutron and proton alignment in the vicinity of the $N=82$ shell closure.
Physical Review C **98**, 014309 (2018).
78. R. M. Kerber, J. M. Fitzgerald, X. Xiao, S. S. Oh, S. A. Maier, V. Giannini, and D. E. Reiter.
Interaction of an archimedean spiral structure with orbital angular momentum light.
New Journal of Physics **20**, 095005 (2018).
79. O. S. Kirsebom, O. Tengblad, R. Lica, M. Munch, K. Riisager, H. O. U. Fynbo, M. J. G. Borge, M. Madurga, I. Marroquin, A. N. Andreyev, T. A. Berry, E. R. Christensen, P. Díaz Fernández, D. T. Doherty, P. Van Duppen, L. M. Fraile, M. C. Gallardo, P. T. Greenlees, L. J. Harkness-Brennan, N. Hubbard, M. Huysse, J. H. Jensen, H. Johansson, B. Jonson, D. S. Judson, J. Konki, I. Lazarus, M. V. Lund, N. Marginean, R. Marginean, A. Perea, C. Mihai, A. Negret, R. D. Page, V. Pucknell, P. Rahkila, O. Sorlin, C. Sotty, J. A. Swartz, H. B. Sørensen, H. Törnqvist, V. Vedia, N. Warr and H. De Witte.
First Accurate Normalization of the beta-delayed alpha Decay of $N=16$ and Implications for the $C-12(\alpha,\gamma)O-16$ Astrophysical Reaction Rate.
Physical Review Letters **121**(14), 142701(2018).
80. N. Lalović, D. Rudolph, Zs. Podolyák, L. G. Sarmiento, E. C. Simpson, T. Alexander, M. L. Cortés, J. Gerl, P. Golubev, F. Ameil, T. Arici, Ch. Bauer, D. Bazzacco, M. A. Bentley, P. Boutachkov, M. Bowry, C. Fahlander, A. Gadea, J. Gellanki, A. Givchev, N. Goel, M. Górska, A. Gottardo, E. Gregor, G. Guastalla, T. Habermann, M. Hackstein, A. Jungclaus, I. Kojouharov, R. Kumar, N. Kurz, M. Lettmann, C. Lizarazo, C. Louchart, E. Merchán, C. Michelagnoli, Th. Moeller, K. Moschner, Z. Patel, N. Pietralla, S. Pietri, D. Ralet, M. Reese, P. H. Regan, P. Reiter, H. Schaffner, P. Singh, C. Stahl, R. Stegmann, O. Stezowski, J. Taprogge, P. Thöle, A. Wendt, O. Wieland, E. Wilson, R. Wood, H. -J. Wollersheim, B. Birkenbach, B. Bruyneel, I. Burrows, E. Clément, P. Désesquelles, C. Domingo-Pardo, J. Eberth, V. González, H. Hess, J. Jolie, D. S. Judson, R. Menegazzo, D.

- Mengoni, D. R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, G. Rainovski, M. D. Salsac, E. Sanchis, J. Simpson, J. J. Valiente Dóbon and the AGATA Collaboration.
Study of isomeric states in $^{198,200,202,206}\text{Pb}$ and ^{206}Hg populated in fragmentation reactions.
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics **45**, 035105 (2018).
81. M. Lettmann, V. Werner, N. Pietralla, P. Doornenbal, A. Obertelli, T. R. Rodríguez, K. Sieja, G. Authelet, H. Baba, D. Calvet, F. Château, S. Chen, A. Corsi, A. Delbart, J.-M. Gheller, A. Giganon, A. Gillibert, V. Lapoux, T. Motobayashi, M. Niikura, N. Paul, J. -Y. Roussé, H. Sakurai, C. Santamaria, D. Steppenbeck, R. Taniuchi, T. Uesaka, T. Ando, T. Arici, A. Blazhev, F. Browne, A. Bruce, R.J. Carroll, L.X. Chung, M.L. Cortés, M. Dewald, B. Ding, F. Flavigny, S. Franchoo, M. Górska, A. Gottardo, A. Jungclaus, J. Lee, B.D. Linh, J. Liu, Z. Liu, C. Lizarazo, S. Momiyama, K. Moschner, S. Nagamine, N. Nakatsuka, C. Nita, C. R. Nobs, L. Olivier, Z. Patel, Zs. Podolyák, M. Rudigier, T. Saito, C. Shand, P. -A. Söderström, I. Stefan, V. Vaquero, K. Wimmer and Z. Xu.
Signatures of triaxiality in low-spin spectra of ^{86}Ge .
Journal of Physics: Conference Series **1023**, 012023 (2018).
82. R. Lica, G. Benzoni, T. R. Rodríguez, M. J. G. Borge, L. M. Fraile, H. Mach, A. I. Morales, M. Madurga, C. O. Sotty, V. Vedia, H. De Witte, J. Benito, R. N. Bernard, T. Berry, A. Bracco, F. Camera, S. Ceruti, V. Charviakova, N. Cieplicka-Orýnczak, C. Costache, F. C. L. Crespi, J. Creswell, G. Fernandez-Martínez, H. Fynbo, P. T. Greenlees, I. Homm, M. Huyse, J. Jolie, V. Karayonchev, U. Köster, J. Konki, T. Kröll, J. Kurcewicz, T. Kurtukian-Nieto, I. Lazarus, M. V. Lund, N. Marginean, R. Marginean, C. Mihai, R. E. Mihai, A. Negret, A. Orduz, Z. Patyk, S. Pascu, V. Pucknell, P. Rahkila, E. Rapisarda, J. M. Regis, L. M. Robledo, F. Rotaru, N. Saed-Samii, V. Sánchez-Tembleque, M. Stanoiu, O. Tengblad, M. Thuerauf, A. Turturica, P. Van Duppen and N. Warr.
Evolution of deformation in neutron-rich Ba isotopes up to $A=150$.
Physical Review C **97** (2), 024305 (2018).
83. J. Litzinger, A. Blazhev, A. Dewald, F. Didierjean, G. Duchene, C. Fransen, R. Lozeva, D. Verney, G. de Angelis, D. Bazzacco, B. Birkenbach, S. Bottoni, A. Bracco, T. Braunroth, B. Cederwall, L. Corradi, F. C. L. Crespi, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Ellinger, E. Farnea, E. Fioretto, R. Gernhauser, A. Goasduff, A. Gorgen, A. Gottardo, J. Grebosz, M. Hackstein, H. Hess, F. Ibrahim, J. Jolie, A. Jungclaus, K. Kolos, W. Korten, S. Leoni, S. Lunardi, A. Maj, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli, T. Mijatovic, B. Million, O. Moller, V. Modamio, G. Montagnoli, D. Montanari, A. I. Morales, D. R. Napoli, M. Niikura, N. Pietralla, G. Pollarolo, A. Pullia, B. Quintana, F. Recchia, P. Reiter, D. Rosso, E. Sahin, M. D. Salsac, F. Scarlassara, P. -A. Soderstrom, A. M. Stefanini, O. Stezowski, S. Szilner, Ch. Theisen, J. J. Valiente-Dobon, V. Vandone and A. Vogt.
Transition probabilities in neutron-rich $^{80,82}\text{Se}$ and the role of the $vg_{9/2}$ orbital.
Physical Review C **97**, 044323 (2018).
84. G. Marquínez-Durán, I. Martel, A. M. Sánchez-Benítez, L. Acosta, J. L. Aguado, R. Berjillos, A. R. Pinto, T. García, J. A. Dueñas, K. Rusek, N. Keeley, K. W. Kemper, M. A. G. Álvarez, M. J. G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J. P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J. L. Flores, J. Gómez-Camacho, J. A. Labrador, F. M. Marqués, A. M. Moro, M. Mazzocco, *et al.*
Interaction of He-8 with Pb-208 at near-barrier energies: He-4 and He-6 production.
Physical Review C **98**(3), 034615 (2018).
85. S. Martínez-Ramírez, L. Diaz, M. Martín-Garrido, L. Fernández-Carrasco and D. Torrens.
In situ chemical modification of C-S-H induced by CO₂ laser irradiation.
Materials and Structures **51**, 24 (2018).
86. T. Mora, F. Sordo, A. Aguilar, L. Mena, M. Mancisidor, J. Aguilar, G. Bakedano, I. Herranz, P. Luna, M. Magan, O. Gonzalez-del Moral, R. Vivanco, F. Jimenez-Villacorta, K. Sjogreen, U. Oden, J.M. Perlado and F.J. Bermejo.
An evaluation of activation and radiation damage effects for the European Spallation Source Target.
Journal Of Nuclear Science And Technology **55**, 548-558 (2018).
87. A. I. Morales, G. Benzoni, H. Watanabe, G. de Angelis, S. Nishimura, S, et al, J. Taprogge.
Is seniority a partial dynamic symmetry in the first ν_2 shell?
Physics Letters, Section B: Nuclear, Elementary Particle and High-Energy Physics **781**, 706-712 (2018).
88. P. Olleros, L. Caballero, C. Domingo-Pardo, V. Babiano, I. Ladarescu, D. Calvo, P. Gramage, E. Nacher, J. L. Tain and A. Tolosa.
On the performance of large monolithic LaCl₃(Ce) crystals coupled to pixelated silicon photosensors.
Journal of Instrumentation, **13** (3), P03014 (2018).

89. R. Orlandi, S. D. Pain, S. Ahn, A. Jungclaus, K. T. Schmitt, D. W. Bardayan, W. N. Catford, R. Chapman, K. A. Chipps, J. A. Cizewski, C. G. Gross, M. E. Howard, K. L. Jones, R. L. Kozub, B. Manning, M. Matos, K. Nishio, P. D. O'Malley, W. A. Peters, S. T. Pittman, A. Ratkiewicz, C. Shand, J. F. Smith, M. S. Smith, T. Fukui, J. A. Tostevin and Y. Utsuno.
Neutron-hole states in ^{131}Sn and spin-orbit splitting in neutron-rich nuclei.
Physics Letters B **785**, 615-620 (2018).
90. P. Papadakis, D. M. Cox, G. G. O'Neill, M. J. G. Borge, P. A. Butler, L. P. Gaffney, P. T. Greenlees, R. -D. Herzberg, A. Illana, D. T. Joss, J. Konki, T. Kröll, J. Ojala, R. D. Page, P. Rahkila, K. Ranttila, J. Thornhill, J. Tuunanen, P. Van Duppen, N. Warr and J. Pakarinen.
The SPEDE spectrometer.
The European Physical Journal A **54**(3), 42 (2018).
91. J. Park, R. Krucken, D. Lubos, R. Gernhauser, M. Lewitowicz, S. Nishimura, D. S. Ahn, H. Baba, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, I. Celikovic, G. de France, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovinazzo, N. Goel, M. Gorska, H. Grawe, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, G. Lorusso, K. Moschner, D. Murai, I. Nishizuka, Z. Patel, M. M. Rajabali, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, L. Sinclair, P. -A. Soderstrom, K. Steiger, T. Sumikama, H. Suzuki, H. Takeda, Z. Wang, H. Watanabe, J. Wu and Z.Y. Xu.
Beta decays of the heaviest $N=Z-1$ nuclei and proton instability of ^{97}In .
Physical Review C **97**, 051301R (2018).
92. J. Park, R. Krucken, D. Lubos, R. Gernhauser, M. Lewitowicz, S. Nishimura, ...A. Jungclaus,...et al.
Erratum: Properties of gamma decaying isomers and isomeric ratios in the Sn 100 region (Physical Review C (2017) 96 (044311) DOI: 10.1103/PhysRevC.96.044311).
Physical Review C **97**, 019901 (2018).
93. M. Piersa, A. Korgul, L. M. Fraile, J. Benito, E. Adamska, R. Álvarez, A. E. Barzakh, G. Benzoni, T. Berry, M. J. G. Borge, M. Carmona, K. Chrysalidis, G. Correia, C. Costache, T. Day Goodacre, D. V. Fedorov, V. N. Fedosseev, G. Fernández-Martínez, M. Fila, D. Galaviz, R. Grzywacz, C. Henrich, A. Illana, Z. Janas, K. Johnston, V. Karanyonchev, M. Kicinska-Habior, R. Lica, M. Madurga, I. Marroquín, B. Marsh, C. Martínez, C. Mazzocchi, K. Miernik, R. Mihai, B. Olaizola, S. Paulaskalas, J. -M. Régis, S. Rothe, V. Sánchez-Tembleque, G. Simpson, Ch. Sotty, L. Stan, M. Stanoiu, M. Stryjczyk, A. Turturica, J. M. Udías, V. Vedia, A. Villa and W. B. Walters.
Investigation of Low-lying States in ^{133}Sn populated in the β^- Decay of ^{133}In using Isomer-selective Laser Ionization.
Acta Physica Polonica B **49** (3), 523-528 (2018).
94. S. R. Pockock, X. Xiao, P. A. Huidobro, and V. Giannini.
Topological plasmonic chain with retardation and radiative effects.
ACS Photonics, **5**(6), 2271-2279 (2018).
95. K. Retko, P. Ropret, R. Cerc Korosec, S. Sanchez-Cortes and M.V. Cañamares.
Characterization of HPC-based photoreduced SERS substrates and detection of different organic dyes.
Journal of Raman Spectroscopy **49**, 1288 (2018).
96. A. Revel, F. M. Marqués, O. Sorlin, T. Aumann, C. Caesar, M. Holl, V. Panin, M. Vandebrouck, F. Wamers, H. Alvarez-Pol, L. Atar, V. Avdeichikov, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, J. M. Boillos, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Caamaño, E. Casarejos, W. N. Catford, J. Cederkäll, M. Chartier, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, E. Cravo, R. Crespo, U. Datta Pramanik, P. Díaz Fernández, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estradé, F. Farinon, L. M. Fraile, M. Freer, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhäuser, P. Golubev, K. Göbel, J. Hagdahl, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, A. Ignatov, H. T. Johansson, B. Jonson, J. Kahlbow, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, A. Knyazev, T. Kröll, N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, S. Lindberg, J. Machado, J. Marganec, A. Movsesyan, E. Nacher, M. Najafi, T. Nilsson, C. Nociforo, S. Paschalis, A. Perea, M. Petri, S. Pietri, R. Plag, R. Reifarh, G. Ribeiro, C. Rigollet, M. Röder, D. Rossi, D. Savran, H. Scheit, H. Simon, I. Syndikus, J. T. Taylor, O. Tengblad, R. Thies, Y. Togano, P. Velho, V. Volkov, A. Wagner, H. Weick, C. Wheldon, G. Wilson, J. S. Winfield, P. Woods, D. Yakorev, M. Zhukov, A. Zilges and K. Zuber.
Strong Neutron Pairing in core+4n Nuclei.
Physical Review Letters **120** (15), 152504 (2018).

97. G. Ribeiro, E. Nacher, O. Tengblad, P. Diaz Fernandez, Y. Aksyutina H. Alvarez-Pol, L. Atar, T. Aumann, V. Avdeichikov, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, J. M. Boillos, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Caamano, C. Caesar, E. Casarejos, *et al.*
Structure of Be-13 studied in proton knockout from B-14.
Physical Review C **98**, 024603 (2018).
98. D. Rosiak, M. Seidlitz, P. Reiter, H. Naïdja, Y. Tsunoda, T. Togashi, F. Nowacki, T. Otsuka, G. Colò, K. Arnsward, T. Berry, A. Blazhev, M. J. G. Borge, J. Cederkäll, D. M. Cox, H. De Witte, L. P. Gaffney, C. Henrich, R. Hirsch, M. Huyse, A. Illana, K. Johnston, L. Kaya, Th. Kröll, M. L. Lozano Benito, J. Ojala, J. Pakarinen, M. Queiser, G. Rainovski, J. A. Rodriguez, B. Siebeck, E. Siesling, J. Snäll, P. Van Duppen, A. Vogt, M. von Schmid, N. Warr, F. Wenander and K. O. Zell.
Enhanced Quadrupole and Octupole Strength in Doubly Magic¹²³Sn.
Physical Review Letters **121**(25), 252501 (2018).
99. A. E. Rubio López, P. M. Poggi, F. C. Lombardo, and V. Giannini.
Landauer's formula breakdown for radiative heat transfer and non-equilibrium Casimir forces.
Physical Review A **97**(4), 042508 (2018).
100. V. Shautsova, T. Sidiropoulos, X. Xiao, N. A. Günsken, N. C. Black, A. M. Gilbertson, V. Giannini, S. A. Maier, L. F. Cohen, and R. F. Oulton.
Plasmon induced thermoelectric effect in graphene.
Nature communications **9**(1), 5190 (2018).
101. Y. Shimizu, T. Kubo, N. Fukuda, N. Inabe, D. Kameda, H. Sato, H. Suzuki, H. Takeda, K. Yoshida, G. Lorusso, H. Watanabe, G. S. Simpson, A. Jungclaus, H. Baba, F. Browne, P. Doornenbal, G. Gey, T. Isobe, Z. Li, S. Nishimura, P. -A. Soderstrom, T. Sumikama, J. Taprogge, Z. Vajta, J. Wu, Z. Xu, A. Odahara, A. Yagi, H. Nishibata, R. Lozeva, C. Moon and H. S. Jung.
Observation of New Neutron-rich Isotopes among Fission Fragments from In-flight Fission of 345 MeV/nucleon ²³⁸U: Search for New Isotopes Conducted Concurrently with Decay Measurement Campaigns.
Journal of the Physical Society of Japan **87**, 014203 (2018).
102. V. Vaquero, E. Repiso and A. Sanfeliu.
Robust and Real-Time Detection and Tracking of Moving Objects with Minimum 2D LiDAR Information to Advance Autonomous Cargo Handling in Ports.
Sensors **19**(1), 107 (2018).
103. F. Wamers, J. Marganec, F. Aksouh, Yu. Aksyutina, H. Alvarez-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, H. Emling, O. Ershova, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, M. Heil, D. H. H. Hoffmann, J. Hoffman, H. T. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, O. A. Kiselev, J. V. Kratz, R. Kulesa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, C. Lehr, R. Lemmon, Yu. A. Litvinov, K. Mahata, C. Müntz, T. Nilsson, C. Nociforo, W. Ott, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarh, A. Richter, K. Riisager, *et al.*
Comparison of electromagnetic and nuclear dissociation of Ne-17.
Physical Review C **97** (3), 034612 (2018).
104. X. Wang, S.-G. Park, J. Ko, X. Xiao, V. Giannini, S. A. Maier, D.-H. Kim, and J. Choo.
Sensitive and reproducible immunoassay of multiple mycotoxins using surface-enhanced raman scattering mapping on 3d plasmonic nanopillar arrays.
Small **14**(39), 1801623 (2018).
105. X. Xiao, X. Li, J. D. Caldwell, S. A. Maier, and V. Giannini.
Theoretical analysis of graphene plasmon cavities.
Applied Materials Today **12**, 283-293 (2018).
106. Q. Yang, C. Zhang, S. Wu, S. Li, Q. Bao, V. Giannini, S. A. Maier, and X. Li.
Photonic surface waves enabled perfect infrared absorption by monolayer graphene.
Nano Energy **48**, 161-169 (2018).
107. L. M. Contreras, P. Sevilla, A. Camara-Artigas, J. G. Hernández-Cifre, B. Rizzuti, F. J. Florencio, M. I. Muro-Pastor, J. García de la Torre, and J. L. Neira.
The Cyanobacterial Ribosomal-Associated Protein LrtA from Synechocystis sp PCC 6803 Is an Oligomeric Protein in Solution with Chameleonic Sequence Properties.
International Journal of Molecular Sciences **19**(7), 1857 (2018).

108. J. L. Neira, M. B. Lopez, P. Sevilla, B. Rizzuti, A. Camara-Artigas, M. Vidal, and J. L. Iovanna.
The chromatin nuclear protein NUPRIL is intrinsically disordered and binds to the same proteins as its paralogue.
Biochemical Journal **475**(14), 2271-2291 (2018).

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

109. J. Pena-Poza, C. Ascaso, M. Sanz, S. Pérez-Ortega, M. Oujja, J. Wierzechos, V. Souza-Egipsy, M.V. Cañamares, M. Urizal, M. Castillejo and M. García-Heras.
Effect of biological colonization on ceramic roofing tiles by lichens and a combined laser and biocide procedure for its removal.
International Biodeterioration & Biodegradation **126**, 86 (2018).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

110. F. Colmenero.
Revealing Rutherfordine Mineral as an Auxetic Material.
Applied Sciences **8**, 2281-2290 (2018).
111. F. Colmenero, J. Cobos, and V. Timón.
Periodic Density Functional Theory Study of the Structure, Raman Spectrum, and Mechanical Properties of Schoepite Mineral.
Inorganic Chemistry, **57** (8), pp 4470-4481 (2018).
112. F. Colmenero, A. M. Fernández, J. Cobos, and V. Timón.
Thermodynamic Properties of Uranyl Containing Materials Based on Density Functional Theory.
Journal of Physical Chemistry C, **122**, 5254-5267 (2018).
113. F. Colmenero, A. M. Fernández, J. Cobos, and V. Timón.
Temperature Dependent Free Energies of Reaction of Uranyl Containing Materials Based on Density Functional Theory.
Journal of Physical Chemistry C, **122**, 5268-5279 (2018).
114. F. Colmenero, A. M. Fernández, V. Timón, and J. Cobos.
Becquerelite mineral phase: crystal structure and thermodynamic and mechanical stability by using periodic DFT.
RSC Advances **8**, 24599-24616 (2018).
115. F. Colmenero, V. Timón.
Study of the structural, vibrational and thermodynamic properties of natroxalate mineral using density functional theory.
Journal of Solid State Chemistry **263**, 131-140 (2018).
116. F. Colmenero, V. Timón, L. J. Bonales, and J. Cobos.
Structural, mechanical and Raman spectroscopic characterization of layered uranyl silicate mineral uranophane- α by density functional theory methods.
Clay Minerals **53**, 377-392 (2018).
117. J. L. Doménech, P. Jusko, S. Schlemmer, and O. Asvany.
The First Laboratory Detection of Vibration-rotation Transitions of $^{12}\text{CH}^+$ and $^{13}\text{CH}^+$ and Improved Measurement of Their Rotational Transition Frequencies.
Astrophysical Journal **857**, 61 (2018).
118. J. L. Doménech, S. Schlemmer, and O. Asvany.
Accurate Rotational Rest Frequencies for Ammonium Ion Isotopologues.
Astrophysical Journal **866**, 158 (2018).

119. C. Goy, A. Kalinin, A. Schottelius, N. Petridis, R. E. Grisenti, G. Tejeda, and J. M. Fernández.
Measuring the temperature of the coldest liquid water.
Cryobiology **85**, 121 (2018).
120. C. Goy, M.A.C. Potenza, S. Dederá, M. Tomut, E. Guillerm, A. Kalinin, K.-O. Voss, A. Schottelius, N. Petridis, A. Prosvetov, G. Tejeda, J. M. Fernández, C. Trautmann, F. Caupin, U. Glasmacher, and R. E. Grisenti.
Shrinking of Rapidly Evaporating Water Microdroplets Reveals their Extreme Supercooling.
Physical Review Letters **120**(1), 015501 (2018).
121. C. Goy, M.A.C. Potenza, S. Dederá, M. Tomut, E. Guillerm, A. Kalinin, K.-O. Voss, A. Schottelius, N. Petridis, A. Prosvetov, G. Tejeda, J. M. Fernández, C. Trautmann, F. Caupin, U. Glasmacher, and R. E. Grisenti.
Erratum: Shrinking of Rapidly Evaporating Water Microdroplets Reveals their Extreme Supercooling.
Physical Review Letters **120**, 129901(E) (2018).
122. R. Luna, G. Molpeceres, J. Ortigoso, M. A. Satorre, M. Domingo, and B. Maté.
Densities, infrared band strengths, and optical constants of solid methanol.
Astronomy & Astrophysics **617**, A116 (2018).
123. L. Martínez, K. Lauwaet, G. Santoro, J. M. Sobrado, R. J. Peláez, V. J. Herrero, I. Tanarro, G. Ellis, J. Cernicharo, C. Joblin, Y. Huttel, and J. A. Martín-Gago.
Precisely controlled fabrication, manipulation and in-situ analysis of Cu based nanoparticles
Scientific Reports **8**:7250 (13 pp) (2018).
124. R. Z. Martínez, D. Bermejo and V. Boudon.
Stimulated Raman Spectroscopy of $^{13}\text{CF}_4$.
Journal of Molecular Spectroscopy **348**, 47-56 (2018).
125. R. Z. Martínez, D. Bermejo, F. Thibault and P. Weislo.
Testing the ab initio quantum scattering calculations for the D_2 -He benchmark system with stimulated Raman spectroscopy.
Journal of Raman Spectroscopy **49**(8), 1339-1349 (2018).
126. B. Maté, G. Molpeceres, I. Tanarro, R. J. Peláez, J. C. Guillemin, J. Cernicharo, and V. J. Herrero.
Stability of CH_3NCO in astronomical ices under energetic processing. A laboratory study.
Astronomy & Astrophysics **861**:61 (12pp) (2018).
127. S. Ishizuka, Y. Kimura, J. Kawano, R. Escribano, T. Yamazaki, T. Hama, and R. Sato.
Immiscibility of Nucleating Aluminum Oxide Nanoparticles in Vapor.
Journal of Physical Chemistry C, **122**, 25092 (2018).
128. J. Ortigoso.
Twelve years before the quantum no-cloning theorem.
American Journal of Physics **86**, 201 (2018).
129. R.J. Peláez, B. Maté, I. Tanarro, G. Molpeceres, M. Jiménez Redondo, V. Timón, R. Escribano, and V.J. Herrero.
Plasma generation and processing of interstellar carbonaceous dust analogs.
Plasma Sources Science and Technology **27**, 035007 (2018).
130. I. Tanarro, B. Alemán, P. de Vicente, J.D. Gallego, J.R. Pardo, G. Santoro, K. Lauwaet, F. Tercero, A. Díaz-Pulido, E. Moreno, M. Agúndez, J.R. Goicoechea, J.M. Sobrado, J.A. López, L. Martínez, J.L. Doménech, V.J. Herrero, J.M. Hernández, R.J. Peláez, J.A. López-Pérez, J. Gómez-González, J.L. Alonso, E. Jiménez, D. Teyssier, K. Makasheva, M. Castellanos, C. Joblin, J.A. Martín-Gago, and J. Cernicharo.
Using radio astronomical receivers for molecular spectroscopic characterization in astrochemical laboratory simulations: A proof of concept.
Astronomy and Astrophysics **609**, A15 (2018).
131. J. Toudert, R. Serna, M. G. Pardo, N. Ramos, R.J. Peláez, and B. Maté.
Mid-to-far infrared tunable perfect absorption by a sub- $\lambda/100$ nanofilm in a fractal phasor resonant cavity.
Optics Express **26**, 34043-34059 (2018).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

132. F. Z. Benabid, O. K. Mallem, F. Zouai, M. E. Cagiao, and D. Benachour.
Effect of the mechanical treatment of alumina on thermal, morphological and dielectric properties of LDPE/Al₂O₃ composites.
South African Journal of Chemistry **71**, 150-154 (2018).
133. M. J. Capitán, J. Álvarez, and C. Navio.
Study of the electronic structure of electron accepting cyano-films: TCNQ: Versus TCNE.
Physical Chemistry Chemical Physics **20**, 10450-10459 (2018).
134. M. J. Capitán, J. Álvarez, and F. Yndurain.
Organometallic MTCNQ films: A comparative study of CuTCNQ: Versus AgTCNQ.
Physical Chemistry Chemical Physics **20**, 21705-21715 (2018).
135. I. Debbah, R. Krache, K. Belkouissem, D. Benachour, and M. E. Cagiao.
Effect of a thermoplastic elastomer compatibilizer (sebs-g-mah) on the properties of PP/PET blends.
Revue Roumaine de Chimie **63**, 11-20 (2018).
136. L. Genovese, M. Soccio, N. Lotti, A. Munari, A. Szymczyk, S. Paszkiewicz, A. Linares, A. Nogales, and T. A. Ezquerra.
Effect of chemical structure on subglass relaxation dynamics of biobased polyesters as revealed by dielectric spectroscopy: 2,5-furandicarboxylic acid vs. trans-1,4-cyclohexanedicarboxylic acid.
Phys Chem Chem Phys **20**, 15696-15706 (2018).
137. J. Martín J, M. Dyson, O.G. Reid, R. Li, A. Nogales, D-M Smilgies, C. Silva, G. Rumbles, A. Amassian, and N. Stingelin.
On the Effect of Confinement on the Structure and Properties of Small-Molecular Organic Semiconductors
Advanced Electronic Materials **4**(1), 1700308 (2018).
138. A. Martínez-Gómez, S. Quiles-Díaz, P. Enrique-Jimenez, A. Flores, F. Ania, M.A. Gómez-Fatou and H.J. Salavagione.
Searching for effective compatibilizing agents for the preparation of poly(ether ether ketone)/graphene nanocomposites with enhanced properties.
Composites A **113**, 180 (2018).
139. S. Paszkiewicz, D. Pawlikowska, A. Szymczyk, B. Dudziec, M. Dutkiewicz, B. Marciniak, A. Linares, and T.A. Ezquerra.
Interfacial interactions in PTT-PTMO/polyhedral oligomeric silsesquioxane (POSS) nanocomposites and their impact on mechanical, thermal, and dielectric properties.
Polymer Bulletin, **75**(11), 4999-5014 (2018).
140. S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, I. Kasprowiak, M. Zenker, R. Pilawka, A. Linares, T.A. Ezquerra, Z. Roslaniec.
Electrical and rheological characterization of poly(trimethylene terephthalate) hybrid nanocomposites filled with COOH functionalized MWCNT and graphene nanosheets.
Polymer Composites, **39**(8) 2961-2968 (2018).
141. J. Ramos, J.F. Vega, and J. Martínez-Salazar.
Predicting Experimental Results for Polyethylene by Computer Simulation.
European Polymer Journal **99**, 298 (2018).
142. I. Reviejo, V. Taberner, M. E. G. Mosquera, J. Ramos, T. Cuenca, and G. Jiménez.
Chiral Titanium(IV) Complexes Containing Polydentate Ligands Based on α -Pinene. Catalytic Activity in Sulfoxidation with Hydrogen Peroxide.
Organometallics **37**, p. 3437-3449 (2018).
143. R.I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernández, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, T.A. Ezquerra, M. Castillejo, P. Moreno, and E. Rebolgar.
Laser induced periodic surface structures formation by nanosecond laser irradiation of poly (ethylene terephthalate) reinforced with Expanded Graphite.
Applied Surface Science **436**, 1193-1199 (2018).

144. A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, M.A. Brady, C. Wang, and E. Rebollar. *Resonant Soft X-ray Scattering Unravels the Hierarchical Morphology of Nanostructured Bulk Heterojunction Photovoltaic Thin Films*. *Physical Review Materials* **2**, 066003 (2018).
145. J. Royes, A. Nogales, T.A. Ezquerro, L. Oriol, R.M. Tejedor, and A. Pinol. *Effect of the polymer architecture on the photoinduction of stable chiral organizations*. *Polymer* **143**, 58-68 (2018).
146. A. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, T.A. Ezquerro, M. Castillejo, J.V. García-Ramos, M.C. García-Gutiérrez. *Patterning Conjugated Polymers by Laser: Synergy of Nanostructure Formation in the All-Polymer Heterojunction P3HT/PCDTBT*. *Langmuir* **34**, 115-125 (2018).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

- J. Pena-Poza, C. Ascaso, M. Sanz, S. Pérez-Ortega, M. Oujja, J. Wierzchos, V. Souza-Egipsy, M.V. Cañamares, M. Urizal, M. Castillejo and M. García-Heras. *Effect of biological colonization on ceramic roofing tiles by lichens and a combined laser and biocide procedure for its removal*. *International Biodeterioration & Biodegradation* **126**, 86 (2018).

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI NON JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. A.N. Antonov, D.N. Kadrev, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra. *Temperature Dependence of the Volume and Surface Contributions to the Nuclear Symmetry Energy within the Coherent Density Fluctuation Model*. *Nuclear Theory* **37**, 79-88 (2018).

6.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

2. P. Enrique-Jiménez, S. Quiles-Díaz, H. J. Salavagione, M. A. Gómez-Fatou, F. Ania, and A. Flores. *Estudio de la nanoestructura y las propiedades mecánicas locales de materiales multifuncionales de polipropileno*. *Materiales Compuestos* **2**, 129 (2018).

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. O. Moreno Díaz "La teoría del todo". Colección 'Desafíos de la Ciencia *National Geographic*' RBA Coleccionables S.A.U., 143 páginas. ISBN 978-84-473-9444-9 (España), Dep. Leg. B.13651-2018. ISBN 978-607-8606-41-2 (México). Traducción al italiano: *La teoria del tutto*, ISSN 2533-090X.

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

- 2 M. Casas-Angulo, R. García Giménez, R. Vigil de la Villa, L. Caneda-Martínez, S. Martínez-Ramírez, M. Frías and I. Vegas.
Activation of kaolinite based coal waste: chemical and thermal activation and their mineralogy.
Serie Conference Proceedings: WASCON 2018-No Cradle, No Grave - Circular Economy Into Practice, pp. 24-38. Pentti Lahtinen and Ville Raasakka (Eds.). ISCOWA: Finish Association of Civil Engineers RIL (2018). ISBN: 978-951-758-631-3.
- 3 M. Frías, L. Caneda, R. García, R. Vigil de la Villa, S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco, I. Vegas, M. I. Sánchez De Rojas.
Coal Mining Waste: An Alternative for the Design of Metakaolinite-Based Eco-Efficient Cements.
Actas Proceedings: International Conference on Construction Research Eduardo Torroja Architecture, Engineering and Concrete (pp. 233-240). Pepa Cassinello, Antonio Blázquez, Maribel Sánchez Rojas and Ángel Sorlí (Eds.). Madrid: fundación Eduardo Torroja (2018). ISBN: 978-84-941820-8-2.
- 4 M. Frías, L. Caneda-Martínez, E. Asensio, M. I. Sánchez De Rojas, E. Villar-Cociña, S. Martínez-Ramírez, R. García, R. Vigil and I. Vegas.
Spectroscopic Analysis and Temporal Evolution of Laser-Induced Plasma in Different Samples.
Serie Conference Proceedings: WASCON 2018- No Cradle, No Grave - Circular Economy Into Practice (pp. 248-256). Pentti Lahtinen and Ville Raasakka (Eds.). ISCOWA: Finish Association of Civil Engineers RIL (2018). ISBN: 978-951-758-631-3.
- 5 M. Frías, L. García, L. Caneda-Martínez, M.I.S. de Rojas, R. García, R. Vigil, I. Vegas and S. Martínez-Ramírez.
Binary Cements with High Coal Waste Contents: Properties and Behaviour Against CO².
Non-Conventional Materials and Technologies. NOCMAT for the XXI Century (pp. 560-568). Millersville (EE. UU.): Materials Research Forum (2018). ISBN: 978-1-945291-82-1.
- 6 B. Hernández, Y. -M. Coïc, E. López-Tobar, S. Sánchez-Cortés, B. Baron, F. Pflüger, S. G. Kruglik, R. Cohen and M. Ghomi.
Dynamical Behavior of Somatostatin-14 and Its Cyclic Analogues as Analyzed in Bulk and on Plasmonic Silver Nanoparticles in Advance.
Protein Chemistry and Structural Biology (vol. **112**, pp. 81-121, 2018). ISBN: 978-0-12-814340-7.
- 7 S. Martínez-Ramírez, Laura Rubio, Ignacio Cascales, Moisés Martín-Garrido and M. Teresa Blanco-Varela.
Efecto del disolvente en la síntesis de nanocal.
Libro de Actas: VI Jornadas FICAL. Fórum Ibérico de la Cal (pp. 263-267). José Ignacio Álvarez Galindo, José María Fernández Álvarez, Íñigo Navarro Blasco, Adrián Durán Benito and Rafael Sirera Bejarano (Eds.). Servicio de Publicaciones, Universidad de Navarra (Spain, 2018). ISBN: 978-84-8081-604-5.
- 8 O. Tengblad, K. Peräjärvi, H. Toivonen and P. Gattinesi.
After-action Analysis of the Magic Maggiore Workshop on Expert Support and Reachback.
Publications Office of the European Union (2018). ISBN:978-92-79-75339-8.

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

- 9 G.M. Muñoz Caro, R. Escribano, editores del libro "Laboratory Astrophysics", Astrophysics and Space Science Library book series (ASSL, volume 451), Springer, 2018. ISBN: 978-3-319-90019.
- 10 Francisco Colmenero. Theoretical Studies of the Structural, Mechanic and Raman Spectroscopic Properties of Uranyl Containing Minerals. In: "Minerals". InTechOpen, London, 2018. Edited by K. S. Essa. ISBN: 978-953-51-6784-6.
- 11 Francisco Colmenero. The Application of Periodic Density Functional Theory to the Study of Uranyl Containing Materials: Thermodynamic Properties and Stability. In: " Density Functional Theory". InTechOpen, London, 2018. Edited by D. Glossman-Mitnik. ISBN: 978-953-51-7020-4.

- 12 Jose Luis Doménech. "Laboratory Astrophysics", Astrophysics and Space Science Library book series (ASSL, volume 451), Springer, 2018. ISBN: 978-3-319-90019-3. Capítulo 13, Infrared Spectroscopy of Ions of Astrophysical Interest, Pages 195-218, 2018.
- 13 Rafael Escribano, Guillermo M. Muñoz Caro. "Laboratory Astrophysics", Astrophysics and Space Science Library book series (ASSL, volume 451), Springer, 2018. ISBN: 978-3-319-90019-3. Capítulo 3, Introduction to Spectroscopy and Astronomical Observations, Pages 27-47, 2018.
- 14 Víctor J. Herrero, B. Maté, G. Molpeceres, M. Jiménez-Redondo, and I. Tanarro. "Laboratory Astrophysics", Astrophysics and Space Science Library book series (ASSL, volume 451), Springer, 2018. ISBN: 978-3-319-90019-3. Capítulo 11, Spectroscopy of Interstellar carbonaceous dust, Pages 159-172, 2018.
- 15 Belén Maté. "Laboratory Astrophysics", Astrophysics and Space Science Library book series (ASSL, volume 451), Springer, 2018. ISBN: 978-3-319-90019-3. Capítulo 5, Infrared Optical Constants and Band Strengths of Ices, Pages 71-86, 2018.

6.3.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- 16 E. Rebollar, T.A. Ezquerro, and M. Castillejo. "Laser Nanostructuring of Polymers", Pulsed Laser Ablation: Advances and Applications in Nanoparticles and Nanostructuring Thin Films. Editors: I.N. Mihailescu, A.P. Caricato. PAN STANFORD PUBLISHING: Singapore, pp. 471-497(2018).

6.4 TESIS DOCTORALES PH.D. THESES

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

Title: Towards General Relativity Through Parametrized Theories

University: Universidad Carlos III de Madrid

Date: 9th of July 2018

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Juan Margalef Bentabol

Supervisor: Jesús Fernando Barbero González and Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

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

Title: Modificaciones estructurales del gel C-S-H irradiado con láser continuo de CO₂

University: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 22nd of June 2018

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Moisés Martín Garrido

Supervisor: Sagrario Martínez Ramírez

Title: Estudios de la Estructura Nuclear de Núcleos Exóticos: los casos del ³¹Ar y ³³Ar

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 23rd of November 2018

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Irene Marroquín Alonso

Supervisor: Olof Tengblad and Enrique Nácher González

Title: In Beam Gamma-ray Spectroscopy of Nuclei near Doubly-magic ¹³²Sn

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 16th of November 2018

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Víctor Vaquero Soto

Supervisor: Andrea Jungclaus

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: Effects of Nuclear Deformation in Two-neutrino Double-beta Decay Processes

*Type: **Grade thesis***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June of 2018

Mark: Sobresaliente M.H

*Candidate: **Daniel Gálvez García***

*Supervisor: **Pedro Sarriguren Suquilbide** and **Óscar Moreno Díaz***

Title: Factores de Forma Magnéticos en Dispersión Elástica de Electrones por Núcleos Impares

*Type: **Master thesis***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June of 2018

Mark: Sobresaliente

*Candidate: **Daniel Merino Jiménez***

*Supervisor: **Pedro Sarriguren Suquilbide** and **Elvira MoyaValgañón***

*Title: **El problema de tres cuerpos: Núcleos halo y efecto Efimov***

*Type: **Master thesis***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June of 2018

Mark: Notable

*Candidate: **Raúl García Álvarez***

*Supervisor: **Eduardo Garrido Bellido***

*Title: **Oscilación de neutrinos***

*Type: **Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June of 2018

Mark: Sobresaliente

*Candidate: **Aitor Alvarado Vargas***

*Supervisor: **Óscar Moreno Díaz***

*Title: **Evidencias, candidatos y detección de materia oscura***

*Type: **Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: June of 2018

Mark: Sobresaliente

*Candidate: **Francisco Javier Suero Sanchís***

*Supervisor: **Óscar Moreno Díaz***

*Title: **Perturbaciones Fermiónicas en Cosmología Cuántica de Lazos Híbrida: Elección de Variables de Creación y Destrucción***

*Type: **Master thesis***

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 7th of July 2018

Mark: Sobresaliente

*Candidate: **Santiago Prado Loy***

*Supervisor: **Guillermo Antonio Mena Marugán***

*Title: **Modelo teórico de detección directa de partículas de materia oscura con núcleos***

*Type: **Master thesis (Trabajo de Fin de Máster)***

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: September of 2018

Mark: Sobresaliente

*Candidate: **Tomás Sánchez Sánchez-Pastor***

*Supervisor: **Óscar Moreno Díaz** and **Elvira Moya de Guerra***

Title: Study of Quantum Fluctuations on Quantum Systems with Missing Levels

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 5th of October 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Coral Manzanera Rui

Supervisor: Rafael Alejandro Molina Fernández and Laura Muñoz

Title: Efectos no-locales en cosmología primordial

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Francisco Javier López Encinas

Supervisor: J.A.R. Cembranos and Luis J. Garay Elizondo

Title: Tensor de energía-momento renormalizado y gravedad semiclásica

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Valentín Boyanov Savov

Supervisor: Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio and Luis J. Garay Elizondo

Title: Estrellas negras en equilibrio en la aproximación semiclásica

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Julio Arrechea Rodríguez

Supervisor: Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio and Luis J. Garay Elizondo

Title: Teoría cuántica de campos en espaciotiempos curvos. Efecto Unruh

Type: Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alberto Martín García-Caro

Supervisor: Luis J. Garay Elizondo

Title: Teoría cuántica de campos en espaciotiempos curvos. Efecto Unruh

Type: Degree Thesis (Trabajo de Fin de Grado)

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alejandro García-Quismondo Martín

Supervisor: Luis J. Garay Elizondo

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

Title: Diseño de un banco de pruebas para detectores de silicio

Type: Master thesis

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 19th of June 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Jorge Luna Duarte

Supervisor: Olof Tengblad

Title: Efecto del Al en la síntesis de nanopartículas de plata en geles C-S-H

Type: Master thesis

University: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Date: 28th of June 2018

Mark: Notable

Candidate: Laura Rubio Higuera

Supervisor: Sagrario Martínez Ramírez

Title: Diagnóstico y Tratamiento del Cáncer mediante SERS

Type: Degree thesis (Trabajo de Fin de Máster)

University: Facultad de Farmacia-Universidad Complutense de Madrid

Date: 18th of July 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Alfonso Gómez del Val

Supervisor: Paz Sevilla Sierra

Title: Desintegración beta de núcleos N~Z en CERN-ISOLDE para astrofísica nuclear

Type: Degree thesis (Trabajo de Fin de Máster)

University: Facultad de Física. Universidad de Valencia

Date: 19th of July 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Jorge Romero Fernández

Supervisor: Nadia Yahlali Haddou and Enrique Nácher González

Title: Characterization of Monoazo Red Pigments by Surface-Enhanced Raman Scattering in Solution and on Dyed Textile Fibers

Type: Master thesis

University: University of Bologna (Italy)

Date: 14th of December 2018

Mark: Sobresaliente

Candidate: Giulia Vanucci

Supervisors: Santiago Sánchez Cortés and María Vega Cañamares

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Correlazioni nanostruttura - proprietà meccaniche del PEEK e sua integrazione in laminati con applicazione in ambito aerospaziale

Type: Master thesis

University: Politecnico di Torino

Date: 18th of September 2018

Mark: 109/110

Candidate: Matteo Malacarne

Supervisor: Marco Sangermano, Patricia Enrique y Araceli Flores

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN

PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
Number of ISI publications	182	179	187	155	159	148	146
Number of non-ISI publications	12	13	18	16	4	3	2
Total stock of PhD fellowships and contracts	18	22	22	18	16	18	17
Number of PhD Theses defended	8	5	8	7	8	4	4
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	57,4*	82,4*	32,9*	88*	89	57,3	87

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI

SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2017)
Nano Energy	1	13.12
Nature Communications	2	12.353
Small	1	9.598
Physical Review Letters	9	8.839
ACS Photonics	3	6.88
Journal of Cleaner Production	1	5.651
Astronomy and Astrophysics	2	5.565
Astrophysical Journal	3	5.551
Journal of High Energy Physics	2	5.541
Advanced Electronic Materials	1	5.466
Journal of Chemical Theory and Computation	1	5.399
European Physical Journal C	1	5.172
Food Hydrocolloids	1	5.089
Inorganic Chemistry	1	4.7
Composites Part A: Applied Science and Manufacturing	1	4.514
Journal of Physical Chemistry C	4	4.484
Applied Surface Science	2	4.439
Physical Review D	6	4.394
Physics Letters, Section B	4	4.254
Scientific Reports	1	4.122
Organometallics	1	4.051
Plasma Sources Science and Technology	1	3.939
Physical Chemistry Chemical Physics	4	3.906
Biochemical Journal	1	3.857
Langmuir:the ACS journal of surfaces and colloids	1	3.789
European Polymer Journal	1	3.741
International Journal of Molecular Sciences	1	3.687
Applied Clay Science	2	3.641
New Journal of Physics	2	3.579

International Biodeterioration & Biodegradation	1	3.562
Construction and Building Materials	2	3.485
Polymer	1	3.483
Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics	3	3.456
Optics Express	2	3.356
Physical Review C	15	3.304
Classical and Quantum Gravity	1	3.283
RSC Advances	1	2.936
Physical Review A	2	2.909
Journal of Raman Spectroscopy	3	2.879
Journal of Chemical Physics	1	2.843
The journal of physical chemistry, A	1	2.836
Colloids and Surfaces A	1	2.829
European Physical Journal A	1	2.799
Microchemical Journal	1	2.746
Sensors	1	2.475
Advances in Protein Chemistry and Structural Biology	1	2.439
Annals of Physics	1	2.367
Physical Review E	1	2.284
Materials and Structures/Materiaux et Constructions	1	2.271
Measurement: Journal of the International Measurement Confederation	1	2.218
Journal of Solid State Chemistry	1	2.179
Journal of Mathematical Psychology	1	2.176
Cryobiology	1	2.05
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	1	1.963
Polymer Composites	1	1.943
Minerals	1	1.835
Journal of Molecular Spectroscopy	3	1.834
Applied Sciences-Basel	2	1.689
Polymer Bulletin	1	1.589
Journal of the Physical Society of Japan	1	1.485
Computational and Theoretical Chemistry	1	1.443
European Physical Journal D	1	1.393
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1	1.336
Journal of Instrumentation	1	1.258
Clay Minerals	1	1.219
Few-Body Systems	2	1.134
American Journal of Physics	1	1.034
South African Journal of Chemistry	1	0.953
Acta Physica Polonica, Series B	2	0.875
Journal of Nuclear science and Technology	1	0.774
Advances in Geosciences	1	0.435
Revue Roumaine de Chimie	1	0.37
APL Photonics	1	0
Applied Materials Today	1	0
Frontiers in Physics	1	0
Journal of Physics: Conference Series	9	0
Photonics	1	0
Physical Review Materials	1	0
Universe	2	0
TOTAL:	146	Average Impact Factor: 3,64

Number of Journals: 79

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

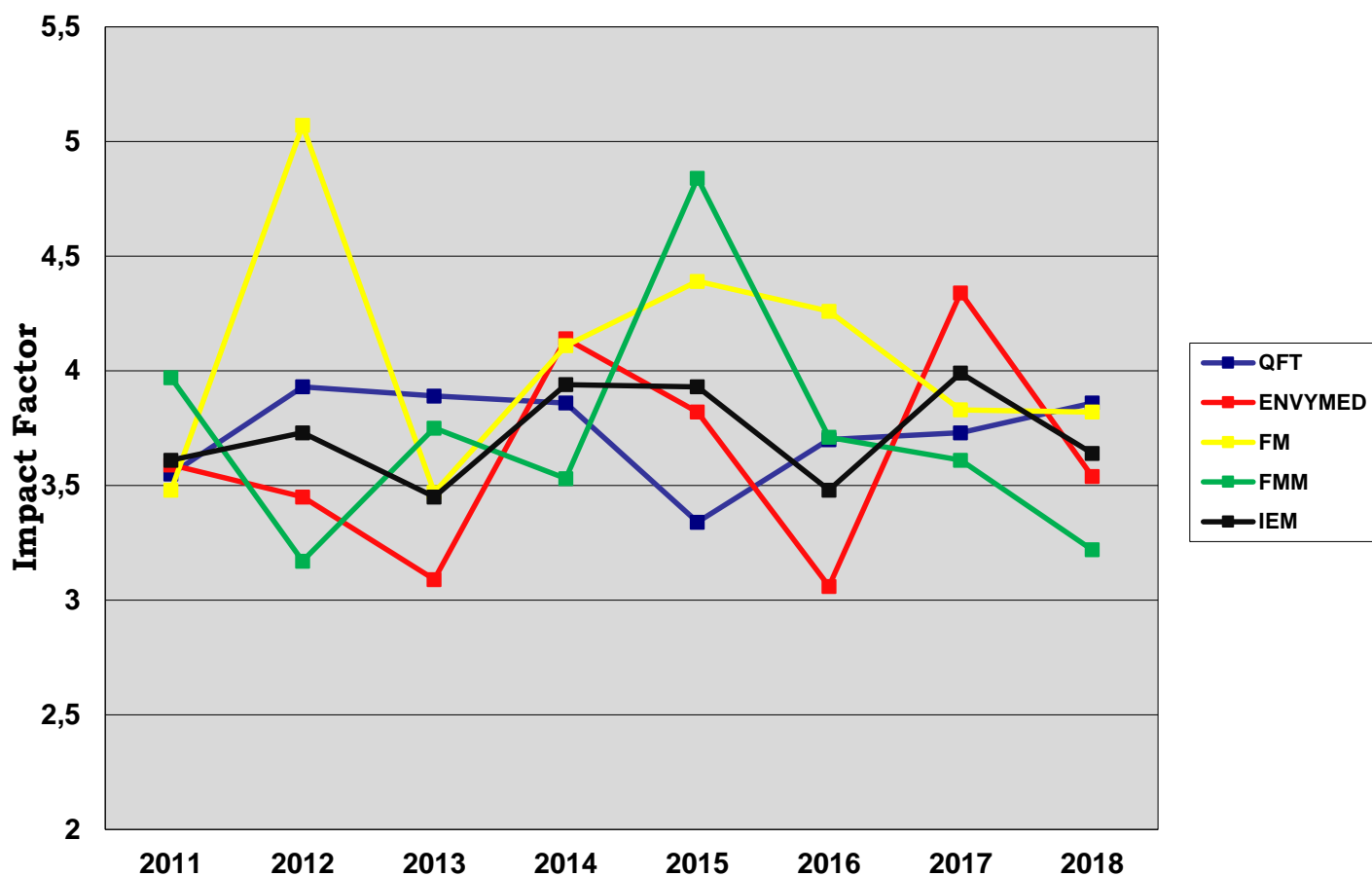
Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (**QFT**)

Molecular Physics (**FM**)

Macromolecular Physics (**FMM**)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (**ENVYMED**)



7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón & Cajal”		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	8	1			1		2				11	1	12
ENVYMED	8	4				1	6	2	1	1	15	8	23
FM	10	2			1		3		2	1	16	3	19
FMM	5	5	1		1		1	2	2	1	10	8	18
ADMON.									2	8	2	8	10
IEM	31	12	1		3	1	12	4	7	11	54	28	82

¹“Authorized Stay” excluded

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

Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados /

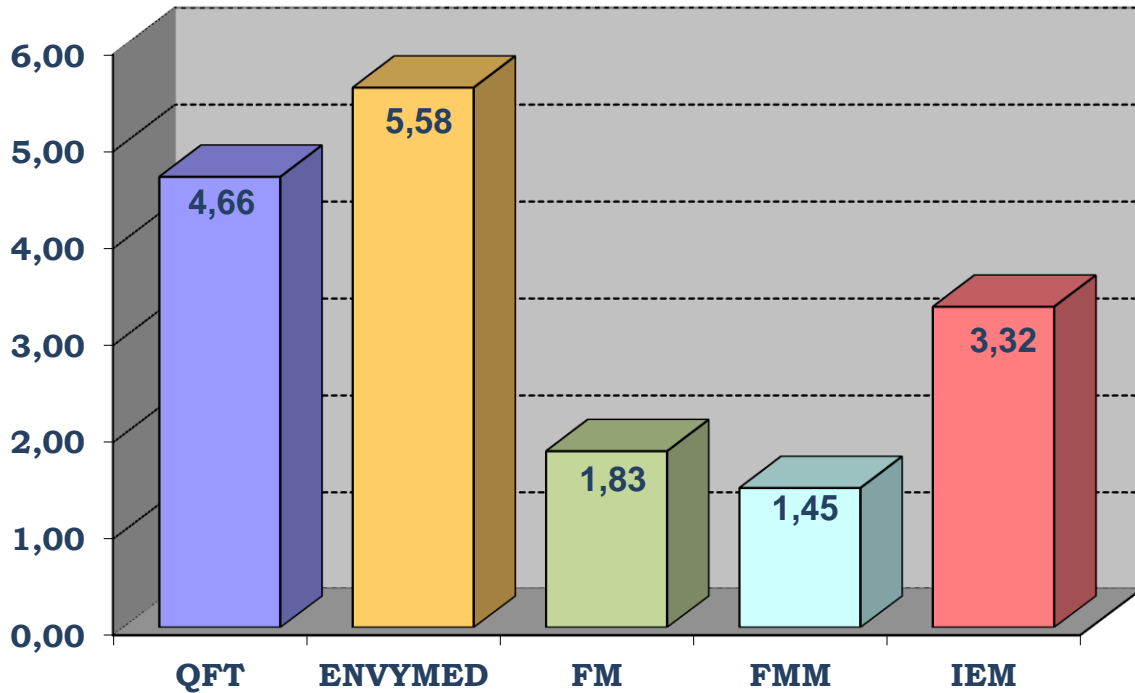
Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 78

7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

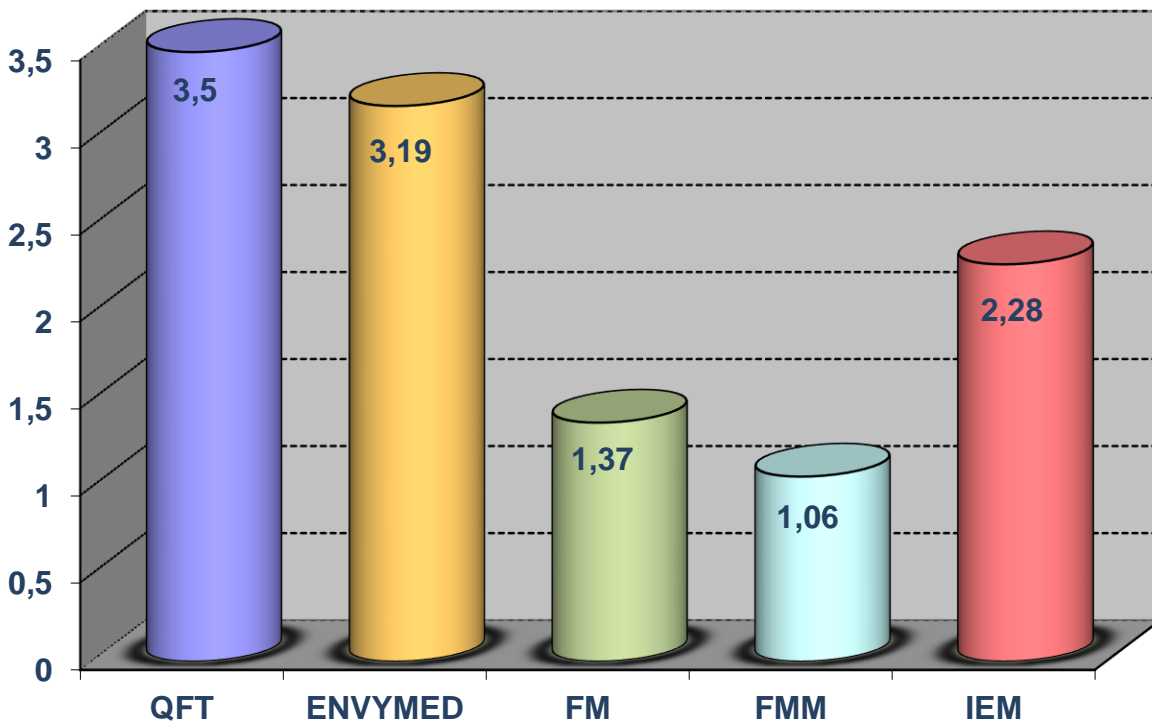
	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	42	66 (+1) ¹	22	15 (+1) ¹	146
Other publications	1			1	2

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 (personal de plantilla más contratados “Ramón y Cajal”)
Ratio by senior researcher (staff plus “Ramón y Cajal”)



Ratio por personal científico (sin incluir personal de apoyo)
Ratio by scientific staff (excluding support staff)

- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior: 3,39**
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher

SUMARIO

Introducción	2
Introduction	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	4
Dirección / Direction	5
Junta de Instituto / Institute Board	5
Claustro Científico / Scientific Staff	5
Departamentos de Investigación / Research Departments	6
Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	6
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	7
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	9
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	10
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	11
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	11
2A. Labor Investigadora	12
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	13
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados	19
2A.3 Dpto. de Física Molecular	28
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular	34
2B. Research Activities	39
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Department	40
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Department	46
2B.3 Molecular Physics Department	55
2B.4 Macromolecular Physics Department	60
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	64
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	65
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	67
3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	69
3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	70

4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	71
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	72
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	72
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	73
4.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	76
4.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	78
4.2 Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	79
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	79
4.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	79
4.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	80
4.3 Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....	80
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	80
4.3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	82
4.3.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	82
4.3.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	82
4.4 Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	83
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	83
4.4.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	83
4.4.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	84
5. Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	85
5.1 Docencia / Teaching	86
5.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	86
5.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	86
5.1.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	87
5.1.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	87
5.2 Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	88
5.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	88
5.2.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	88
5.2.3 Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics.....	89
5.2.4 Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics.....	90
5.3 Premios y Otros Méritos /Awards.....	91
5.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry.....	91

5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	91
5.3.3	Dpto. de Física Molecular r/ Molecular Physics	92
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	92
5.4	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	93
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas /Theoretical Physics and Chemistry	93
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	95
5.4.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	96
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	96
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	97
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	97
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	98
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	98
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas / Theoretical Physics and Chemistry	98
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados / Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	98
5.6.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	99
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular / Macromolecular Physics	99
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	100
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	101
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	101
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	104
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	111
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	113
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications	114
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	114
6.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	114
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	114
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	114
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	115
6.3.3	Dpto. de Física Molecular / Molecular Physics	115
6.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	116

6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses.....	116
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	116
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	116
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	117
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	117
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	118
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	119
7.	Tablas y Datos / Tables and Data	120
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	121
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	121
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	123
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments	124
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments.....	124
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments.....	125

