

**INSTITUTO DE
ESTRUCTURA DE LA
MATERIA**

**CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS**

**MEMORIA
DE LA LABOR REALIZADA DURANTE EL
AÑO 2011**

ANNUAL REPORT 2011



**GOBIERNO
DE ESPAÑA**

**MINISTERIO
DE ECONOMÍA
Y COMPETITIVIDAD**



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

INTRODUCCIÓN

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

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía Molecular o la Gravitación. Durante 2011, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y en otras áreas relacionadas.

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

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

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

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

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2011 en 186 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

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

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have been including other areas such as Nuclear Physics, Molecular Spectroscopy and Gravitation. During 2011, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry and other related fields.

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

Theoretical Chemistry and Physics (QFT)
Nuclear, Vibrational and Desordered 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, Regrography and the Receptionists are provided by the CFMAC and shared with the other Institutes that form the Centre.

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

This scientific activity, during 2011, has crystallized in 186 ISI publications.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
STRUCTURE OF THE INSTITUTE

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Vicedirector: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz.

Vicedirector: Dr. José M. Fernández Sánchez.

Gerente / Manager: D^a. Pilar Criado Escribano.

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretaria: D^a. Pilar Criado Escribano

Vocales:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. José M. Fernández Sánchez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Dr. José González Carmona

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dra. Aurora Nogales Ruiz

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Dr. Santiago Sánchez Cortés

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán

Secretario: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador en plantilla:

Dr. Fernando Anía García

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dra. M^a Esperanza Cagiao Escotado

Dra. M^a José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. Luis Mariano Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Prof. Concepción Domingo Maroto

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Prof. Tiberio Ezquerro Sanz

Dr. Ricardo Fernández Perea

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Dr. Óscar Gálvez González

Prof. M^a José García Borge

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Dr. Eduardo Garrido Bellido

Prof. José González Carmona

Prof. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Andrea Jungclaus

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
Dra. Belén Maté Naya
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. Rafael Molina Fernández
Prof. Salvador Montero Martín
Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dra. Mirta Rodríguez Pinilla
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dra. M^a Luisa Senent Diez
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dr. Guzmán Tejeda Gala
Dr. Olof E.I. Tengblad
Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Prof. José González Carmona

Profesor de Investigación / Research Professor

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide

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

Dra. Natalia Inostroza Pino

Postdoctoral MAE-AECID / Postdoc Contract MAE AECID (until September 2011)

Dr. Pedro Pérez Fernández

Postdoctoral (con cargo a proyecto) / Postdoc Contract

Dr. Amando Relación Perez

Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE (until October 2011)

Dra. Manuela Rodríguez Gallardo

Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dr. Rayner Rodríguez Guzmán

Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE (until September 2011)

Dr. Javier Rodríguez Vignote

Postdoctoral JdC / Postdoc Contract JdC

Dr. Pablo San José Martín

Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dr. Mariano Sánchez Castellanos

Postdoctoral CONACYT / Postdoc Contract CONACYT

Dr. Carlos Esebbag Benchimol

Doctor Vinculado/ Adjoint Reasercher

Dr. Luis Javier Garay Elizondo

Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher

Prof. Elvira Moya Valgañón (de Guerra)

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

Doctor Vinculado/ Adjoint Researcher

D. Mikel Fernández Méndez

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Daniel Huerga Gomez

Becario Predoctoral FPI/ PhD Fellowship FPI

D. Daniel Martín de Blas

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Javier Antonio Olmedo Nieto

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

Dña. Carolina Romero Redondo

Becaria Predoctoral I3P / PhD Fellowship I3P (until February 2011)

Dña. Esther Vicente Torrrico

Becaria Predoctoral JAE / PhD Fellowship JAE

D. Raúl de Diego Martínez

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Isabel Pacho Velázquez

Contratado Técnico-JAE / Technician-JAE (since September 2011)

**DPTO. DEESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS
/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY****Jefe del Departamento / Head of Department:**

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación / Research Professor

Profª. M^a José García Borge

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. José V. García Ramos

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Pedro Carmona Hernández

Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / Research Scientist

Dr. José A. Sánchez Gil

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Luís Díaz Sol

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Enrique Nácher González

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate.

Dra. Ana Delia Becerril Reyes

Contrato Postdoctoral EXNUC/ Postdoc Contract EXNUC (since November 2011)

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Contrato Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dr. Luis Froufe Pérez

Contrato Postdoctoral JAE/ Postdoc Contract JAE

Dr. Fernando López-Tejeira Sagües

Contrato Postdoctoral / Postdoc Contract

Dra. Lorena Roldán

Contrato Postdoctoral MAE-AECI / Postdoc Contract MAE-AECI

Dr. José Sánchez del Río Sáez

Contrato Postdoctoral CPAN / CPAN Postdoc Contract

Dra. Francesca Zocca

Contrato Postdoctoral CPAN / CPAN Postdoc Contract

Profª. Juana Bellanato Fontecha

Profesor de Investigación "ad honorem" / Research Professor "ad honorem"

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / Adjoint Researcher

D. Andrés Illana Sisón

Titulado Superior Contratado / University Graduate

Dr. Riccardo Orlandi

Titulado Superior Contratado CPAN / CPAN University Graduate

D. Vicente Pesudo Fortes

Titulado Superior Contratado / University Graduate

D. Jorge Sánchez Rosado

Titulado Medio Contratado CPAN / CPAN Mechanic Engineer (since May 2011)

D. José Antonio Briz Monago

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Mariano Carmona Gallardo

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE

D. Mario Alberto Cubero Campos

Becario Predoctoral- CSIC-Costa Rica / PhD Fellowship CSIC-Costa Rica.

Dña. Elena del Puerto Nevado

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

Dña. Adianez García Leis

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Irene Izquierdo Lorenzo

Becaria Predoctoral- JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Raquel de los Llanos

Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-JAE (until February 2011)

D. Ramón Paniagua Domínguez

Becario Predoctoral-JAE / PhD Fellowship-JAE

D. Guillermo Ribeiro Jiménez

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Rogelio Rodríguez Oliveros

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Ángel Perea Martínez

Técnico Especializado G. Medio / Technician

Dr. Alessandro Feis

Autorizado Permanencia / Authorized Stay (from September)

Dña. Jana Kubackova

Autorizada Permanencia / Authorized Stay (from October)

D. Jan Taprogge Autorizado Permanencia / Authorized Stay (from December 2011)
Dña. Jennifer Walker Autorizada Permanencia / Authorized Stay (until May 2011)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. Purificación Corchete Corchete Ayudante de Investigación OPI/ Research Assistant OPI
Dña. Margarita Hernández González Contratada Programa de Técnicos de Apoyo (PTA) / Department Technical Support Program Contract (PTA)
D. Eduardo López Tobar Contratado Técnico-I3P/Technician-I3PJAE Tec

DPTO. DEFÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José Luis Doménech Martínez Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza Profesor de Investigación / Research Professor
Prof. Concepción Domingo Maroto Profesora de Investigación / Research Professor
Prof. Rafael Escribano Torres Profesor de Investigación / Research Professor
Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga Profesor de Investigación / Research Professor
Prof. Salvador Montero Martín Profesor de Investigación / Research Professor
Dr. José María Fernández Sánchez Investigador Científico / Research Scientist
Dra. Isabel Tanarro Onrubia Investigadora Científica / Research Scientist
Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres Científico Titular / Tenured Scientist
Dra. Belén Maté Naya Científica Titular / Tenured Scientist
Dr. Juan Ortigoso Martínez Científico Titular / Tenured Scientist
Dr. Julio Francisco Santos Gómez Científico Titular / Tenured Scientist
Dr. Guzmán Tejeda Gala Científico Titular / Tenured Scientist
Dra. Mirta Rodríguez Pinilla Investigadora Contratada RyC/Postdoc ContractRyC(until 31 October 2011)
Dr. Óscar Gálvez González Investigador ContratadoRyC/Postdoc ContractRyC
Dra. Esther Carrasco Burgos Investigadora Contratada JdC / Postdoc Contract JdC
Dra. Yamilet Rodríguez Lazcano Investigadora Contratada JAE/ Postdoc Contract JAE
Dr. Luis Rubio Lago Investigador Contratado-JAE UA / Postdoc Contract-JAE UA
Dña. María Encina López Arias Becaria Predoctoral-UA / PhD Fellowship-UA
D. Miguel Jiménez Redondo Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (since 1 October 2011)
D. Juan Hernández Morilla Autorizado Permanencia / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

Dña. María José Malagón Sisto Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant OPI
D. Miguel Ángel Moreno Alba Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant OPI
D. David Pérez Risco Ayudante de Investigación OPI / Research Assistant OPI
Dña. Teresa Cueto Senra Técnica Superior Contratada JAE-Tec / Technician Contract JAE-Tec

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. Aurora Nogales Ruíz Investigador Científico / Research 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
Dr. Daniel R. Rueda Bravo Investigador Científico / Research Scientist
Dr. Fernando Ania García Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Maria Esperanza Cagiao Escohotado	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. M ^a Cruz García Gutiérrez	Científico Titular / Tenured Scientist
Dra. Amelia Linares Dos Santos	Científico Titular / Tenured Scientist
Dr. Juan Francisco Vega Borrego	Científico Titular / Tenured Scientist
Dr. Francisco Javier Ramos Díaz	Investigador Contratado/ Postdoc Contract (until 30-9-2011). Autorizado Permanencia / Authorized Stay (since 1-10-2011).
Dr. Alejandro Sanz Parras	Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE (until 15-5-2011)
Dra. Michela Soccio	Investigadora Contratada JAE DOC / Postdoc JAE
Prof. Francisco José Baltá Calleja	Profesor de Investigación “ad honorem” / Research Professor “ad honorem”
Dra. Carmen Arribas Arribas	Doctor Vinculado / Adjoint Researcher
D. Juan Felipe Franco González	Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato	Becario Predoctoral / PhD Fellowship
D. Daniel Martínez Tong	Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE
Dña. Nuria Robledo Álvaro	Becario Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P
Dña. Sara Sanmartín Sánchez	Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI
D. Ernesto Vicente Alique	Titulado Superior Contratado/ University Graduate (since 1-12-2011)
D. Andreas Beensen	Autorizado Permanencia / Authorized Stay (1-10-2011)
Dr. Jaime Javier Hernández Rueda	Autorizado Permanencia / Authorized Stay (till 30-10-2011)
Dña. Marianella Hernández Santana	Autorizada Permanencia / Authorized Stay
Dña. Adriana Jargour Pinto	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (2-4-2011/16-9-2011)
Dña. Nathalie Jargour Pinto	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (25-7-2011/22-12-2011)
Dna.Karina Jerónimo Martínez	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (25-7-2011/22-12-2011)
Dra. Almudena Ochoa Mendoza	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (4-7-2011/30-9-2011)
Dña. Yudith da Silva Caires	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (28-4-2011/16-9-2011)
Dña Grisel Zapino Guzmán	Autorizada Permanencia / Authorized Stay (25-7-2011/22-12-2011)
Personal de apoyo / Support Staff:	
Dr. José Carlos Canalda Cámara	Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate
D. Rafael Núñez Ramírez	Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate
Dña. Ana M. Montero Cuellar	Ayudante de Investigación OPI/ Research Assistant OPI

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

Dña. Pilar Criado Escribano	Gerente / Manager
Dña. M ^a Teresa Burriel Barceló	Técnico Especialista de Grado Medio OPI [CFMAC]
Dña. Purificación Díez Rodríguez	Administrativo Cuerpo General Administración Estado
Dña. Ana María García Arribas	Ayudante de Investigación /Research Assistant
Dña. M ^a Carmen García Collado	Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado
Dña. Isabel Lombán Botello	Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo
Dña. Concepción Nieto Serrano	Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática
Dña. Susana Esteban Serrano	C. Auxiliares Postales y de Telegrafos
Dña. Eva Sánchez García	Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes JAE

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

ALMACÉN

Dña. Clara Isabel Cardeñosa García
D. Jose Manuel Segura Gonzalez

Administrativo cuerpo General Administración Estado
C. Auxiliar de Telecomunicaciones

BIBLIOTECA

Dña. Pilar Arangüena Pernas
Dña. Flora Granizo Barrena
Dña. Isabel Delgado Oliva
Dña. Margarita Martínez Álvarez
D. Samuel López Márquez

Técnico Especialista de Grado Medio OPI
Técnico de Biblioteca y Documentación
Titulado Técnico OPI
E. Administrativo de Organismos Autónomos
Administrativo

CONSERJERÍA

D. Eduardo Balbas Utrillas
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA

D. Luis Dorado González
D. Francisco Daniel Rincon Fuentes
D. Andrés Ubiña Perez

Analista Programador
Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS
Técnico Superior de Gestión y Servicios Comunes
JAEI/EM

MANTENIMIENTO

Dña. Belén Palero Fernández
D. Fernando Pueyo García
D. Héctor Bueno Duran

Ayudante de Investigación OPI
Técnico Especialista Grado Medio OPI
Técnico Superior de Actividades Técnicas y Profesionales

PROYECTOS Y DELINEACIÓN

D. Andrés de Frutos Gómez

Titulado Técnico Especializado

PUBLICACIONES Y REPROGRAFÍA

D. Julián Gil Risco

Oficial Activ. Técnicas y Profesionales

TALLER MECÁNICO

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

Ayudante de Investigación
Ayudante de Investigación

TALLER ÓPTICO

D. José Lasvignes Pacheco

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

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Químico-Física Teórica aplicada a la Astrofísica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Cosmología Cuántica.
- Gravedad Cuántica de Lazos.
- Física de agujeros negros.
- Métodos computacionales en Física Gravitacional.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Integridad cuántica y modelos exactamente solubles.
- 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.
- Colisiones inelásticas no reactivas a bajas temperatura.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Grupo de renormalización.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en hiperarmónicos esféricos.
- Métodos ab initio de alto nivel.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVEDAD CUÁNTICA Y COSMOLOGÍA CUÁNTICA

Durante el año 2011 hemos completado el trabajo llevado a cabo durante los últimos años sobre el estudio de la entropía de los agujeros negros en el formalismo de la gravedad cuántica de lazos (GCL). En concreto hemos podido concluir los estudios relativos al comportamiento asintótico de la entropía como una función del área del horizonte. El problema abierto más importante que quedaba por resolver era averiguar si la estructura observada en el régimen de áreas pequeñas estaba presente también en el régimen asintótico. Para ello, durante el año 2010 desarrollamos una serie de métodos estadísticos que permitieron definir un procedimiento de aproximación para la entropía de conteo que explicaba la desaparición de la referida estructura a grandes escalas. El resultado descrito anteriormente puede ser entendido desde una perspectiva completamente distinta si recurrimos al formalismo de la mecánica estadística y, en particular, a algunos aspectos relacionados con su fundamentación matemática. En este contexto se plantea el estudio de las propiedades matemáticas de la entropía de cualquier sistema físico como función de la energía (la variable relevante para la física estadística ordinaria). En particular es especialmente importante determinar bajo qué circunstancias la entropía es una función suficientemente suave de la energía y sus propiedades de concavidad y convexidad. El primer punto es relevante porque las magnitudes termodinámicas (por ejemplo la temperatura de un sistema) están definidas como derivadas de la entropía mientras que el segundo punto es central para la comprensión de la estabilidad de los sistemas físicos. Lo que demuestran los teoremas clásicos es que en el llamado *límite termodinámico* la entropía satisface condiciones razonables de suavidad y concavidad.

Durante el año pasado hemos dedicado un esfuerzo considerable a entender, aprovechando las técnicas combinatorias que hemos desarrollado en los últimos años para el estudio de agujeros negros, el problema del límite termodinámico para este tipo de sistemas. Dado que en nuestro caso es posible describir de manera efectiva tanto la colectividad microcanónica (de área) como la canónica, hemos podido estudiar lo que sucede con los agujeros

negros en este límite (que no ha de ser confundido con el de grandes áreas). La conclusión más importante de nuestros trabajos es que, en el límite termodinámico, la entropía de los agujeros negros que hemos estudiado es una función del área, suave, cóncava y con un comportamiento compatible con la ley de Bekenstein-Hawking que establece una relación lineal entre entropía y área. Hay que destacar, sin embargo, el hecho de que las correcciones subdominantes para la entropía termodinámica (logarítmicas en el área) no coinciden con las de la entropía de conteo o estadística. Este hecho ha de ser relevante no solo en el contexto de la GCL sino también en otros esquemas que se ocupan de este tipo de problemas, en particular, las teorías de cuerdas.

Hemos empleado también métodos de GCL para analizar la vertiente cuántica en sistemas cosmológicos, en el campo de especialización que se conoce hoy en día como cosmología cuántica de lazos (CCL). En particular, durante 2011 hemos implementado y comparado las llamadas prescripciones de dinámica mejorada que existen en la literatura, estudiando espaciotiempos homogéneos e isótropos que contienen un campo escalar sin masa. Hemos comprobado que todas estas prescripciones conducen a los mismos resultados cualitativos para estados semiclásicos en dichos espaciotiempos cosmológicos, y que el comportamiento físico es similar en realidad incluso para estados que no son tan semiclásicos o en regímenes donde los efectos cuánticos empiezan a no ser totalmente despreciables, pero existen diferencias. Lo que es más importante, no todas estas prescripciones tienen las mismas propiedades desde el punto de vista de las simulaciones numéricas. En concreto, una prescripción introducida por nosotros parece ser especialmente sencilla de implementar y reduce considerablemente el tiempo de cómputo. Hemos optimizado los códigos de nuestra librería numérica para simulaciones en CCL, con objeto de aprovechar plenamente las características de esta prescripción específica.

Durante este año también hemos aplicado técnicas de lazos a cosmologías inhomogéneas del tipo Gowdy y que incluyen un campo escalar sin masa, alcanzando por vez primera una cuantización completa y consistente en el marco de la CCL para un modelo con grados de libertad locales en el contenido material y en la geometría. Hemos desarrollado una propuesta para la cuantización híbrida de este modelo, y lo hemos implementado completamente, probando la consistencia de nuestra construcción. El objetivo de este trabajo ha sido múltiple: a) obtener una descripción cuántica exacta de cosmologías inhomogéneas con campos materiales que incluyan efectos de geometría cuántica de lazos, b) determinar el espacio de estados físicos y un conjunto completo de observables físicos, c) probar que la dinámica cuántica está bien puesta, d) demostrar que las singularidades cosmológicas se resuelven en este marco, y e) mostrar que uno recupera la cuantización de Fock estándar para las inhomogeneidades en regímenes apropiados para estados físicos. Más aún, restringiendo el análisis al caso vacío, hemos discutido también el efecto de las inhomogeneidades en el Big Bounce que reemplaza la singularidad de Big Bang, usando la teoría efectiva asociada a nuestro modelo cuántico exacto. El estudio analítico ha confirmado la solidez cualitativa del rebote (bounce). Las simulaciones numéricas han mostrado que esta solidez es también cuantitativa. Además, este análisis numérico ha demostrado que las amplitudes de las inhomogeneidades no cambian estadísticamente en el proceso de rebote, excepto cuando son pequeñas, caso en el que parecen ser incrementadas por un tipo de mecanismo amplificador. Este mecanismo podría explicar la amplitud relativamente grande de las fluctuaciones primordiales si se confirmara en modelos cosmológicos más realistas.

En sistemas descritos por campos como el anterior, que poseen un número infinito de grados de libertad, un problema grave son las ambigüedades que se encuentran en el proceso de cuantización, que afectan al resultado final en la teoría cuántica. En el caso de una cuantización de Fock, donde se puede alcanzar un concepto de partícula (al menos hasta cierto punto), una parte importante de estas ambigüedades son las que surgen en la elección de una representación cuántica. Este problema se encuentra en teoría cuántica de campos estándar en espaciotiempos curvos, pero también en el caso de la cuantización de las inhomogeneidades dentro del esquema híbrido que hemos propuesto en el marco de la CCL. En situaciones estacionarias se sabe que criterios de simetría o de energía seleccionan una cuantización de Fock única. Nosotros, destacablemente, hemos sido capaces de probar recientemente que, incluso en escenarios no estacionarios, es posible elegir una única cuantización de Fock introduciendo criterios de a) invariancia del vacío bajo las simetrías de las ecuaciones de campo, y b) unitariedad en la evolución dinámica (respecto a un tiempo emergente relacionado con los elementos de área o volumen). Esta unicidad proporciona una solidez considerable a los resultados de la cuantización y a sus predicciones físicas. Específicamente, los teoremas de unicidad alcanzados hasta ahora se aplican al caso de campos escalares en cualquier topología espacial compacta y en cualquier dimensión espacial igual o menor que tres. Las aplicaciones para la cuantización sin ambigüedad de perturbaciones en cosmología son casi inmediatas.

Otra línea de investigación que hemos desarrollado ha sido el análisis de la radiación de Hawking en un agujero negro percibida por diferentes observadores. El método se basa en la introducción de una temperatura efectiva que varía con el tiempo. En primer lugar introducimos un vacío no estacionario que simula el proceso de encendido de la radiación de Hawking en un espacio tiempo estacionario y después lo analizamos desde la perspectiva de observadores estáticos en posiciones radiales fijas, observadores en caída libre y observadores estáticos que posteriormente se liberan y caen libremente. Los observadores en caída libre no perciben un estado de vacío cuando cruzan el horizonte, sino que sienten una temperatura efectiva un poco más grande que la que sentía antes de

empezar a caer. Este fenómeno se explica en términos de un efecto Doppler en el momento de cruce del horizonte. Desde otra perspectiva, usamos el problema transplanckiano de la radiación de Hawking como guía en la búsqueda de un modelo para la evaporación de agujeros negros o de objetos similares. Hemos argumentado que existen solo tres posibles situaciones, dependiendo de si la noción clásica de horizonte se preserva ante la presencia de fenómenos de alta energía y de si los objetos astrofísicos oscuros y compactos que observamos tienen horizontes o no. Hemos visto que i) una teoría con señales superluminales de alta energía y horizontes aparentes provocaría grandes inestabilidades en términos astrofísicos y que ii) las pulsaciones estelares de objetos con tamaño muy próximo a su radio gravitatorio pueden dar lugar a emisión de Hawking.

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL GRAFENO

Durante el año 2011, hemos investigado dos aspectos diferentes de las propiedades electrónicas del material de carbono, que tienen que ver con el confinamiento electrónico en bicapas de grafeno y con la generación dinámica de una brecha de energía en grafeno por efecto de la interacción de Coulomb.

Hemos estudiado la posibilidad de localizar los electrones en grafeno por medio de campos gauge sintéticos, creados por el desajuste entre las dos redes de átomos de carbono en bicapas sometidas a tensión o a una rotación relativa. Es sabido que la estructura regular más favorable en bicapas de grafeno corresponde al llamado apilamiento de Bernal (también denotado AB), en el que los átomos de carbono de una subred en una de las capas caen sobre los átomos de la red complementaria de la otra capa. Cuando las redes están distorsionadas, bien por tensión, cizalla o rotación relativa, el ajuste perfecto de los átomos se pierde, y se observa la aparición de patrones de Moiré típicos donde regiones de apilamiento AB alternan con otras de apilamiento AA, en las que los átomos de carbono de una capa caen sobre los átomos homólogos de la otra capa. Hemos podido demostrar que la alternancia entre los dos tipos de apilamiento produce el mismo efecto que el de un campo gauge no-abeliano con simetría SU(2), con la capacidad de confinar los electrones en aquellas regiones de la bicapa donde la intensidad periódica del campo efectivo se hace máxima.

Aplicando por ejemplo cizalla uniaxial a una de las capas, se puede crear un patrón de Moiré cuasi-unidimensional con una secuencia perfecta de apilamiento AA-AB-BA a lo largo de una de las direcciones de la bicapa. En este caso, la densidad electrónica puede ser confinada en canales unidimensionales correspondientes a las regiones de apilamiento AA, o bien AB-BA, dependiendo del momento longitudinal de los estados electrónicos. La estructura de bandas resulta ser muy parecida a la encontrada en nanotubos de carbono de gran diámetro en un campo magnético perpendicular, donde también hay una modulación periódica del flujo alrededor del nanotubo. La subbanda de energía más baja se hace extremadamente plana para grandes períodos de la modulación del apilamiento, correspondiendo con la localización de estados en las regiones con apilamiento AB o BA. Por encima de un cierto valor del momento longitudinal, los estados electrónicos adquieren dispersión a lo largo de ramas lineales en energía. Esto marca la aparición de modos de propagación a lo largo de canales unidimensionales con apilamiento AA, en estrecha analogía con el comportamiento de los estados de borde en el efecto Hall cuántico de un líquido de electrones en campo magnético en dos dimensiones.

Hemos aplicado también nuestro modelo de campo gauge para lograr entender las propiedades electrónicas de las bicapas con rotación, donde el giro relativo de una capa con respecto a la otra da lugar a una superred con regiones alternantes entre apilamiento AA, AB y BA. Hemos visto que el sistema electrónico desarrolla una subbanda de más baja energía extremadamente plana para ciertos valores mágicos del ángulo de rotación, demostrando que esta peculiaridad es consecuencia directa de la presencia de un campo gauge no-abeliano efectivo con simetría SU(2) sobre la bicapa. La ausencia de dispersión es realmente la señal de estados localizados de baja energía ligados en este caso alrededor de las regiones de apilamiento AA, dando lugar a una red triangular de puntos cuánticos. Hemos encontrado que este patrón de confinamiento es consistente con la periodicidad de los máximos en la intensidad del campo efectivo, así como que la primera situación en que la subbanda más baja se hace plana corresponde al punto en que la celda unidad de la superred llega a contener precisamente el cuanto de flujo gauge.

La presente descripción abre la posibilidad de usar en general las bicapas de grafeno para diseñar interferometría no-abeliana por efecto Aharonov-Bohm, de manera que la amplitud de los electrones inyectados en una de las capas pueda oscilar e incluso ser completamente transferida a la otra capa durante su propagación. Además, nuestro estudio puede abrir también una nueva vía para atacar el problema de la localización de los estados electrónicos, que no son constreñidos de manera efectiva por barreras de potencial escalar en grafeno, pero que podrían ser confinados y manipulados en dispositivos electrónicos hechos de bicapas de grafeno.

Por otra parte, hemos continuado con la investigación de la generación dinámica de una brecha de energía en el espectro del grafeno, analizando en particular el impacto que pueden tener las correcciones de autoenergía del electrón en la ruptura de la simetría quiral de la teoría de fermiones de Dirac en interacción. Nuestro punto de partida ha sido la aproximación de tipo escalera en el vértice electrón-hueco que aparece en la función respuesta para

la generación dinámica de la brecha de energía, que hemos mejorado con la introducción sistemática de las correcciones de autoenergía en los estados de electrón y de hueco de la serie de diagramas en escalera.

En este marco, hemos podido incorporar el efecto de la renormalización de la velocidad de Fermi en el acoplamiento crítico para la generación dinámica de la brecha de energía. A este respecto, el aumento de la velocidad de Fermi a bajas energías ha sido ya observado en experimentos realizados por el grupo de A. K. Geim en grafeno con niveles muy bajos de dopado. Nuestros resultados han mostrado que el efecto de renormalización de la velocidad de Fermi induce una reducción importante en la intensidad de la ruptura dinámica de simetría. Hemos encontrado que la generación dinámica de la brecha de energía puede tener lugar por encima de un valor crítico en la constante de estructura fina del grafeno $\alpha_c \approx 4.9$, en el caso de apantallamiento RPA estático del potencial de interacción en la serie de diagramas en escalera, y por encima de un valor $\alpha_c \approx 1.75$ en un tratamiento más apropiado con apantallamiento dinámico de la interacción.

La principal conclusión de nuestro trabajo es que el valor $\alpha_c \approx 1.75$, resultante de la consideración más precisa de las correcciones por interacción entre muchos cuerpos, se encuentra todavía por debajo del valor nominal de la constante de estructura fina del grafeno en vacío. Esto significa que una capa del material aislado en suspensión debería encontrarse en la fase con generación dinámica de la brecha de energía, lo que está de acuerdo con la mayor parte de estudios teóricos menos precisos sobre el tema, pero aparentemente en discrepancia con las medidas experimentales actuales en muestras de grafeno suspendido en vacío. Una observación clave es, sin embargo, que si la ruptura de la simetría quiral tiene lugar de acuerdo con nuestras estimaciones, debería conducir a una brecha de energía al menos tres órdenes de magnitud por debajo de la escala de alta energía de la teoría de fermiones de Dirac. Esto sugiere, por tanto, que no se puede descartar la generación dinámica de una brecha de energía en grafeno aislado en suspensión, si bien su traza experimental podría únicamente verse en muestras adecuadas, en las que el nivel de Fermi esté ajustado en un rango de energías por debajo de la escala del milielectronvoltio con respecto al punto de neutralidad de carga.

MODELOS EXACTAMENTE SOLUBLES

Los modelos integrables de Richardson-Gaudin (RG) surgen a partir de la combinación de la solución exacta de Richardson del Hamiltoniano BCS y del modelo de magnetismo cuántico de Gaudin. Formalmente estos modelos se pueden clasificar en dos grandes familias, la familia racional y la familia hiperbólica. La familia racional contiene el Hamiltoniano BCS y otros muchos Hamiltonianos exactamente solubles que fueron estudiados en la última década en las áreas de física nuclear, granos ultrapequeños, puntos cuánticos, gases fríos fermiónicos y bosónicos atrapados, etc. Sin embargo, no se encontraron aplicaciones de la familia hiperbólica hasta muy recientemente. En 2009 se demuestra que el Hamiltoniano de pairing $px+ipy$, que describe la interacción de fermiones sin espín en redes en 2D es exactamente soluble y pertenece a la familia hiperbólica. Este Hamiltoniano, que fue estudiado previamente por N. Read en conexión con el efecto Hall fraccionario, tiene un diagrama de fases con una transición fase topológica (sin parámetro de orden). A partir de la solución exacta, hemos estudiado este diagrama de fases para Hamiltonianos de un canal (interacción de pairing). Este modelo presenta una transición de fase cuántica de 3º orden compatible con la ausencia de un parámetro de orden. La función de onda exacta de los modelos de RG es un producto de pares correlacionados cuyas energías de ligadura son las soluciones de las ecuaciones de Richardson. El tamaño de la función del condensado, que puede ser accesible experimentalmente en gases ultrafríos polarizados, presenta una divergencia en la transición de fase y por lo tanto se puede utilizar como signatura experimental. La estructura de los pares de Cooper es más difícil de revelar experimentalmente, pero su tamaño ha sido relacionado con el umbral de energía en espectros de radio frecuencia para gases atrapados. La estructura de estos pares de onda p es diferente a la de los de onda s y presenta un cambio brusco entre la fase de weak pairing (pares extendidos) y la fase de strong pairing (pares ligados). Estudiamos también la extensión del modelo de pairing $px+ipy$ a un modelo de dos canales en el que la interacción de pares atómicos es mediada por una resonancia Feshbach de onda p . El diagrama de fases correspondiente también presenta una transición de fase de 3º orden que caracterizamos por medio de la *fidelidad cuántica*. El análisis de esta magnitud nos llevó a concluir que esta transición de fase no puede ser descrita por la teoría de Landau.

La segunda realización de la familia hiperbólica que obtuvimos consiste en un Hamiltoniano exactamente soluble con energías de partícula independiente no-degeneradas y una interacción de pairing separable con dos parámetros libres. Uno de ellos es la intensidad de la interacción y el otro un cutoff en energías. Demostramos que estos parámetros se pueden elegir convenientemente para reproducir las propiedades físicas del estado fundamental de núcleos pesados descritos por la fuerza de Gogny. En particular, mostramos que el modelo hiperbólico describe con gran precisión la función de onda Hartree-Fock-Bogoliubov obtenida a partir de la fuerza de Gogny. También describimos cualitativamente los gaps de Gogny que muestran un comportamiento compatible con la raíz cuadrada de los factores de forma en la interacción hiperbólica. Este nuevo modelo exactamente soluble abre las puertas a la construcción de un algoritmo autoconsistente de Hartree-Fock más pairing exacta para la descripción de masas y otras propiedades de baja energía de núcleos pesados.

TRANSPORTE CUÁNTICO

Durante 2011 hemos concentrado nuestros esfuerzos en el estudio de la fase de transmisión a través de puntos cuánticos en el régimen de bloqueo de Coulomb. Una de las diferencias fundamentales entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica es que la evolución temporal en mecánica cuántica se determina por amplitudes de probabilidad complejas en lugar de cantidades reales. La fase asociada es un elemento clave para entender los fenómenos de transporte en física mesoscópica como, por ejemplo, las oscilaciones de la conductancia Aharonov-Bohm, la localización débil y las fluctuaciones de la conductancia. Durante mucho tiempo la fase de la amplitud de transmisión a través de un punto cuántico no se podía medir directamente. Los experimentos pioneros de Yacoby *et al* abrieron a finales de la década de los noventa un nuevo campo en la física mesoscópica al insertar un punto cuántico en uno de los brazos de un interferómetro de Aharonov-Bohm. Sin embargo, estos experimentos han escapado a una explicación teórica consistente y genérica. Especialmente sorprendente es el hecho de que la fase de transmisión para puntos cuánticos de gran número de electrones siempre experimenta un salto abrupto de π entre dos resonancias.

Hemos investigado el transporte a través de puntos cuánticos balísticos en el régimen de bloqueo de Coulomb. Hemos demostrado mediante argumentos teóricos, basados en la forma de las funciones de onda para sistemas cuánticos caóticos, y cálculos numéricos la emergencia de largas secuencias universales de resonancias y saltos de fase en el límite de corta longitud de onda. Nuestros resultados presentan un acuerdo cualitativo con los experimentos de interferometría de Aharonov-Bohm. Además, nuestros resultados predicen la desaparición del régimen universal en presencia de campos magnéticos fuertes y en puntos cuánticos más grandes en el régimen difusivo.

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

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

Más concretamente, durante los últimos meses nuestro trabajo se ha centrado fundamentalmente en los siguientes dos aspectos: En primer lugar, en el estudio de la reacción triple alfa y su tasa de producción a temperaturas muy bajas. El hecho de que en estas condiciones las energías relativas involucradas sean muy bajas, claramente por debajo de la resonancia 0^+ en ^8Be , implica que la descripción secuencial del proceso a través de dicha resonancia no es obvia. De hecho, hemos encontrado que una descripción a través de una captura directa, sin poblar estados de dos cuerpos intermedios, puede dar lugar a un incremento de la tasa de producción de hasta 7 órdenes de magnitud para una temperatura de 10^7 GK. El segundo de los aspectos investigados se refiere a la descripción de reacciones 1+2 mediante el uso de las dos relaciones integrales desarrolladas recientemente. Hemos encontrado que este método es altamente eficiente para describir procesos por debajo de la energía umbral para la ruptura del blanco. Lógicamente, el siguiente paso ha de ser el investigar la validez del método para describir reacciones por encima de este umbral, que llevan por tanto a la ruptura del blanco. En este sentido, cálculos preliminares llevados a cabo recientemente permiten ser muy optimistas al respecto.

DESINTEGRACIÓN BETA EN PROCESOS ASTROFÍSICOS rp

Hemos estudiado las tasas de desintegración débil en las condiciones de densidad y temperatura que gobiernan los procesos de captura rápida de protones para una serie de núcleos entre Ni y Sn, deficitarios en neutrones, que representan los ‘puntos de espera’ del proceso rp y sus vecinos más próximos. La parte de estructura nuclear del problema se ha descrito mediante cálculos de Skyrme Hartree-Fock deformado con correlaciones BCS y QRPA que reproducen no sólo las vidas medias de desintegración beta sino también las distribuciones Gamow-Teller medidas en condiciones terrestres. En el trabajo se discuten las distintas sensibilidades de las tasas frente a las condiciones de densidad y temperatura del medio estelar.

Existen varias diferencias entre las tasas producidas en el laboratorio o en un medio estelar debidas a las altas densidades y temperaturas. El principal efecto de la temperatura es la población de estados excitados en el núcleo padre que por tanto puede decaer desde estos estados con patrones diferentes a los del estado fundamental que es el único explorado en condiciones de laboratorio. Otro efecto a tener presente es que los átomos en estos escenarios de alta densidad y temperatura están completamente ionizados y por tanto, los electrones no están ligados al átomo sino formando un plasma con una distribución de Fermi-Dirac. Esto abre la posibilidad de una captura continua de electrones inexistente en condiciones terrestres. Hemos estudiado tanto la desintegración de estados excitados como las contribuciones debidas a desintegración beta y a captura continua de electrones. Los resultados obtenidos indican que existe una contribución no despreciable de la desintegración de estados excitados que es particularmente importante para estados excitados a baja energía. También obtenemos contribuciones comparables de desintegración beta y de captura continua de electrones para los puntos de espera en las condiciones de densidad y temperatura que se dan en el proceso rp. Esto es importante porque en los cálculos usuales de simulaciones astrofísicas únicamente se consideran contribuciones de desintegración beta.

TRANSICIONES DE FORMA EN ISÓTOPOS RICOS EN NEUTRONES

El estudio de la evolución de la forma nuclear en función del número de nucleones es un tema de candente actualidad tanto desde el punto de vista teórico como experimental. Especialmente interesantes son las situaciones en las que se produce un cambio drástico de la estructura nuclear entre núcleos vecinos tal y como sucede para isótopos ricos en neutrones de la región de masa en torno a $A=100$. Las variaciones estructurales conllevan en algunos casos cambios súbitos en determinadas propiedades nucleares que pueden utilizarse como auténticas signatures de una transición de forma.

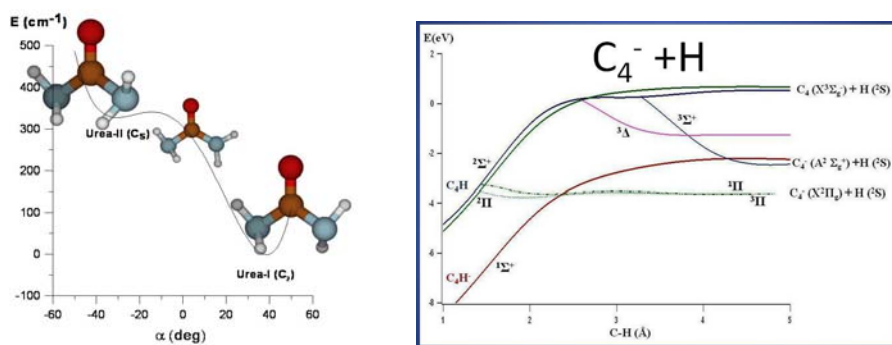
Hemos estudiado propiedades globales y espectroscópicas en cadenas de isótopos pares e impares en esa región másica mediante métodos de campo medio autoconsistente de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) basados en funcionales de la densidad de energía de tipo Gogny con rango finito. Además de la parametrización más conocida de Gogny, DIS, hemos considerado también la más reciente de ellas DIM. La descripción de núcleos impares se ha realizado mediante la Equal Filling Approximation (EFA), que permite mantener las ventajas que conlleva la invariancia bajo inversión temporal. Hemos investigado diversas propiedades nucleares sensibles a la forma nuclear, tales como energías de separación de neutrones, radios cuadráticos de carga o asignaciones de spin y paridad en los estados fundamentales. En algunas cadenas isotópicas hemos encontrado signatures muy claras, tanto en los radios de carga como en el spin y paridad, de transiciones de forma alrededor de $N=60$. En otras cadenas la transición desaparece estabilizando una de las formas o bien desarrollando regiones de triaxialidad. Concluimos que un análisis combinado de estos observable podría utilizarse en general para predecir sin ambigüedades nuevas regiones nucleares en las que puedan surgir cambios de forma.

QUÍMICO-FÍSICA TEÓRICA APLICADA A LA ASTROFÍSICA

Durante el año 2011, hemos realizado estudios moleculares clasificables dentro de las tres sub-líneas de investigación que desarrolla el grupo: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas de interés astrofísico, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas de importancia astrofísica y atmosférica y determinación de secciones eficaces en colisiones inelásticas no reactivas a muy bajas temperaturas. En todos estos trabajos, empleamos como herramienta básica el cálculo 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-SPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Las moléculas y los problemas que se han tratado son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias. La investigación se lleva a cabo dentro de los programas de aprovechamiento científico de los nuevos observatorios Herschel y ALMA.

En los últimos años, hemos venido desarrollando estudios muy detallados dirigidos a la caracterización de cadenas carbonadas de importancia astrofísica. Las cadenas carbonadas se consideran relevantes tanto como especies aisladas como intermediatos de reacciones de formación de las grandes moléculas como son los PAHs o los fullerenos. Estudiamos con métodos muy precisos cadenas de pequeños tamaño que son relativamente abundantes en fuentes ricas en carbono. Iniciamos la secuencia de estudio caracterizando cadenas puras tipo C_n con un número reducido de átomos (n) y susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo con los instrumentos del nuevo observatorio espacial Herschel. Actualmente, estamos estudiando cadenas neutras y cargadas tipo C_nX_m ($X=Si, S$ o H) y tipo $SiNH_n$. Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son detectables mediante radioastronomía. En consecuencia, son especies relevantes de cara al futuro proyecto ALMA. Hemos prestado atención especial a los aniones debido al reciente interés que despiertan en la comunidad astrofísica, estudiando C_4H^- (especie detectada por los astrónomos del IEM) y a los aniones tipo SiC_n^- y SiC_nH^- . Hemos determinado estructuras isoméricas, superficies de potencial para los

primeros electrónicos estados, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización y efectos Renner-Teller y rovibrónicos.



De cara a la puesta en marcha de ALMA, es necesario conocer los espectros en las regiones milimétrica y submilimétrica de especies moleculares no-rígidas conteniendo a los elementos interestelares más abundantes C, O N y H. Muchas de estas moléculas se clasifican como prebióticas. Se caracterizan por presentar niveles vibracionales de muy baja energía que pueden estar poblados a muy bajas temperaturas. Estos niveles corresponden a las vibraciones de gran amplitud que inter-transforman estructuras de mínima energía a través de barreras de potencial factibles. Por el interés que despiertan para la astrofísica molecular, estamos estudiando con métodos ab initio muy precisos los movimientos torsionales y de flexión del dimetil-eter y formato de metilo. Recientemente, se ha propuesto como molécula interestelar a la Urea cuyos espectros en la zona del infrarrojo lejano medidos en fase gaseosa están deficitariamente explorados. Llevamos a cabo este trabajo en colaboración con la Universidad de Huelva y la Universidad de Lille.

Finalmente, se ha finalizado el estudio de la colisión a muy bajas temperaturas del SO₂ con para y orto H₂. La determinación de parámetros colisionales entre especies abundantes en fuentes astrofísicas e hidrógeno molecular es fundamental para comprender las intensidades observadas. Estas dependen de las poblaciones de los niveles que, a su vez, son consecuencia de excitaciones y des-excitaciones radiativas y colisionales. Estamos estudiando óxidos de azufre y cadenas carbonadas. Los parámetros se obtienen en cálculos de dinámica molecular que emplean como datos de entrada, superficies de potencial de Van der Walls. Estas se determinan con cálculos ab initio muy precisos. El estudio teórico del SO₂ ha permitido predecir transiciones y un máser motivando nuevas observaciones astrofísicas en las que se ha puesto de manifiesto la veracidad de las predicciones.

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

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad.
- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.

- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el Calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- I+D de electrónica multiplexado con regulación en función de cambio de temperatura.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear Experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para fuentes de neutrones.
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SERS, SEF y SEIRA) sobre nanoestructuras metálicas.
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico.
- Espectroscopías SERS, SEF y SEIRA aplicadas a la detección de contaminantes y sustancias empleadas en dopaje deportivo.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula.
- Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas): Raman y Fluorescencia.
- Metamateriales en el dominio óptico.
- Espectroscopía de Plasmas de Ablación inducidos por Radiación Láser Infrarroja.
- Espectroscopía de Ruptura Dieléctrica en Plasmas inducidos por Láser (LIBS).

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.
- Diseño mecánicas en CATIA.
- Métodos computacionales y Matemáticas.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Simulación numérica.
- Métodos computacionales.
- Dispersión de neutrones.
- Técnicas calorimétricas.
- Medidas de adsorción.
- Espectroscopía infrarroja (Dispersiva, Normal, FTIR, micro IR y SEIR).
- Espectroscopía Raman (Normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia Inducida por Láser (LIF).
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de barrido (SEM).
- Análisis estadístico multivariante.
- Física Teórica (Electrodinámica Clásica) y Cálculos Numéricos.
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Fluorescencia Inducida por Láser (LIF).
- Deposición asistida por láser

LABOR INVESTIGADORA:

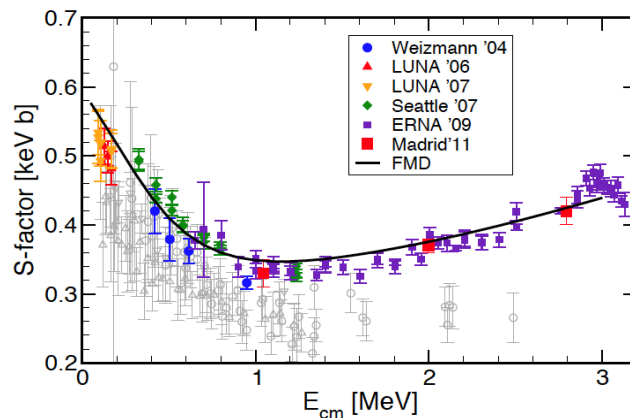
CARACTERIZACIÓN DE ESTADOS NUCLEARES Y REACCIONES RELEVANTES EN PROCESOS DE NÚCLEO-SÍNTESIS ESTELAR

A lo largo de los años hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados, así como la determinación de la tasa de ciertas reacciones de interés astrofísico. En memorias previas informábamos del estudio de las tres alfas

provenientes de niveles de ^{12}C poblados a partir de la desintegración β^+ de ^{12}N y β^- de ^{12}B y del estudio de los niveles excitados de baja energía de ^9Be relevantes en el cálculo de la tasa de la reacción $^4\text{He}(\alpha, \gamma)^9\text{Be}$ alternativa a la de fusión de triple alfa en escenarios estelares ricos en neutrones. En paralelo hemos estudiado la reacción $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ cuyos canales a través de ^{12}C y ^9B nos dan información sobre estados no accesibles a la desintegración beta complementando la información sobre la estructura de estos núcleos. Este trabajo está basado en experimentos realizados en la línea de Física Nuclear instalada en el Tandetrón del Centro de Micro Análisis de Materiales (CMAM) del cual todavía se esta trabajando en la elaboración de artículos que contengan los últimos resultados obtenidos como son: “*Observation of a decay from a state in ^{10}B at 11.48 MeV*”, PRC en proceso de aceptación: “*Improved limit on direct α decay of the Hoyle state*”, PRL enviado y “*Properties of ^{12}C resonances above the triple-alpha threshold from studies in complete kinematics*”, en preparación.

La reacción $^4\text{He}(^3\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ es de gran interés astrofísico y una de las principales fuentes de incertidumbre en la determinación de la intensidad del flujo de neutrinos solares que resultan de la desintegración del ^8B proveniente de la reacción $^7\text{Be}(p, \gamma)^8\text{B}$. Además la reacción de interés juega un papel fundamental en la determinación de la abundancia del ^7Li primordial en el universo. La medida de la sección eficaz de dicha reacción, y la obtención, a partir de ella, del factor astrofísico $S_{34}(0)$ constituyen parámetros de crucial relevancia en los modelos astrofísicos. Las limitaciones experimentales impiden medir la sección eficaz de esta reacción a la energía de interés (23 keV), por tanto, los modelos utilizan la extrapolación del factor astrofísico encontrado a las distintas energías $S_{34}(E)$ para determinar su valor de interés.

En colaboración con científicos de la universidad de York y del Instituto Weizmann de Israel se han realizado medidas en el CMAM en noviembre de 2009 y mayo de 2011 tienen por objetivo de determinar la sección eficaz de $^3\text{He} + ^4\text{He} \rightarrow ^7\text{Be}$ a las distintas energías. Se ha utilizado la técnica de activación que consiste en la detección de la radiación gamma de 478 keV proveniente del primer estado excitado de ^7Li poblado en la desintegración de ^7Be . A partir de la sección eficaz se determina el factor astrofísico para las diferentes energías. Los resultados obtenidos se recogen en un artículo titulado “*New Cross Section measurements for the $^4\text{He}(^3\text{He}, \gamma)^7\text{Be}$ Reaction at medium Energies*” que será enviado en breve para su publicación. Este trabajo constituirá parte de la tesis de Mariano Carmona Gallardo, que será complementado con el estudio realizado en TRIUMF sobre la sección eficaz de la misma reacción usando una técnica alternativa de medida.



La figura muestra una compilación de los datos existentes para el factor S_{34} , junto con nuestros resultados (Madrid'11). Los puntos en color provienen de las referencias [PRL93(2004) 262503; Weizmann'04], [PRL93(2004) 262503; LUNA06, 07], [Phys. Rev. C76(2007) 055801; Seattle'07], [PRL 102(2009) 232502; ERNA'09]. Los puntos en gris provienen de la referencia [PRL 106(2011)042502], y también para energías intermedias se muestran los datos de Parker et al. [Phys. Rev. 131(1963)2578], discrepantes con los de Madrid'11 y ERNA'09. Los cálculos ab-initio realizados por T. Neff, PRL 106(2011)042502 se muestra superpuesta a los puntos experimentales.

La reacción $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ juega un papel fundamental en astrofísica nuclear pues determina la fracción de carbono con respecto al oxígeno en el Universo; y tiene también una influencia importante en la nucleosíntesis de todos los elementos más pesados. La sección eficaz de esta reacción está dominada por varias resonancias y capturas directas tanto al estado fundamental como a varios estados excitados del ^{16}O . En particular, estamos interesados en los estados 2^+ y 1^- , a 6917 y 7117 keV, respectivamente. Nuestro grupo ha propuesto usar la reacción $^{19}\text{F}(p, \alpha)^{16}\text{O}$ para

poblar los estados de interés en ^{16}O . En Diciembre del 2011 realizamos la primera medida en CMAM con objeto de determinar el montaje experimental óptimo para la detección en coincidencia de dos partículas alfa de baja energía y el proton que alimenta el estado. Nuestro postdoc Ana D. Becerril (EXNUC), en colaboración con L. Buchmann de TRIUMF, Canadá, analizará los datos de la prueba realizada en Diciembre y propondrá en 2012 una medida en CMAM con un montaje experimental optimizado.

ESTUDIO DE LA POLARIZABILIDAD DIPOLAR DE NÚCLEOS LIGEROS

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

El parámetro de polarizabilidad es una propiedad fundamental del núcleo y es una medida de su respuesta a un campo eléctrico externo. En el límite adiabático (que corresponde a energías de excitación altas), la sección eficaz de dispersión elástica se desvía de la predicción de la fórmula de Rutherford proporcionalmente a la intensidad de la polarizabilidad dipolar. Por lo tanto, al medir la sección eficaz de dispersión elástica de un núcleo contra un blanco pesado a energías sub-Colombianas, podemos determinar el parámetro de polarizabilidad de éste núcleo.

Para conocer el efecto de la polarizabilidad en núcleos estables y en casos extremos como los núcleos con halo hemos realizado experimentos tanto en el CMAM como en diferentes instalaciones de haces radioactivos. A continuación se detallan los avances realizados en el año 2011.

El efecto de polarizabilidad dipolar debe ser particularmente grande en núcleos con halo. Nos proponemos, pues, hacer un estudio experimental y teórico, de la dispersión de los núcleos con halo a energías próximas a la barrera Coulombiana, ya que se debe manifestar como una reducción de la sección eficaz elástica a ángulos grandes. Este proyecto se lleva a cabo en colaboración con grupos de las Universidades de Sevilla y Huelva con los que tenemos unidades asociadas. Hemos estudiado núcleos con halo de dos neutrones como ^6He , ver memoria 2006, y en 2008 hemos medido ^{11}Li en TRIUMF (Canadá) y de un neutrón como ^{11}Be en REX-ISOLDE (Eur. Phys. J. A, 2009, PRL, 2010, PRC enviado). El análisis de los datos de TRIUMF está prácticamente terminado y constituyen el trabajo de tesis de nuestro estudiante (becario convenio CSIC – Costa Rica) Mario Cubero. Se ha observado que la sección eficaz diferencial elástica obtenida para ^{11}Li sobre plomo presenta una enorme reducción que sólo se puede explicar si se consideran efectos de dipolarizabilidad y acoplamiento al continuo. Estos resultados se han presentado en varias conferencias este año (FUSION11, Saint-Malo, Rutherford Centennial Conference, Manchester) y se recogen en una publicación que se encuentra en estado de preparación.

En Noviembre del 2011 nuestro grupo llevó a cabo un experimento en CMAM dedicado a medir la sección eficaz elástica del ^3He en un blanco pesado. El objetivo de este trabajo es determinar la polarizabilidad del ^3He y compararla con mediciones previas que muestran discrepancia. Un haz de ^3He fue acelerado en el Tandem de 5 MV del CMAM y se hizo incidir en un blanco de ^{208}Pb , en el rango de energías entre 9 y 15 MeV. El setup consistió en dos detectores de Silicio segmentados en 16 bandas horizontales y 16 bandas verticales (DSSD) que proveen sensibilidad a la posición. Los DSSDs se colocaron en ángulos traseros con respecto a la dirección del haz; también colocamos un detector de barrera de Si a 60° para normalización de la sección eficaz.

ESTUDIO DE LA DESINTEGRACION BETA DEL NÚCLEO $N = Z$ ^{72}Kr

La desintegración beta del núcleo con $N=Z$ ^{72}Kr fue medida en ISOLDE (CERN) con “*Lucrecia*”, un Espectrómetro Gamma de Absorción Total (TAS) con el objetivo de determinar el signo de la deformación a partir de la distribución de fuerza Gamow-Teller. El análisis de los datos puso de manifiesto la necesidad de información adicional sobre la competencia de electrones de conversión y emisión gamma en las transiciones de baja energía. Por esta razón, se realizaron medidas complementarias con el fin de determinar los coeficientes de conversión para las transiciones de baja energía en el núcleo hijo, ^{72}Br . De especial interés era la determinación precisa de la vida media del estado isomérico a 101 keV en el ^{72}Br y la multipolaridad de la transición gamma que lo conecta con el estado fundamental puesto que el espín de éste último se ha cuestionado y no está firmemente establecido.

El análisis de los datos de electrones de conversión ha sido realizado y los resultados del mismo se encuentran en proceso de publicación. Se han obtenido los coeficientes de conversión de varias transiciones de baja energía en la desintegración beta de ^{72}Kr lo cual nos ha proporcionado información sobre la multipolaridad de las mencionadas transiciones y como consecuencia, se ha obtenido valiosa información acerca del espín-paridad de diversos estados excitados en el núcleo hijo ^{72}Br . En concreto, la multipolaridad de la transición que conecta el estado isomérico con

el estado fundamental ha sido obtenida así como una nueva medida de la vida media de dicho estado isomérico a través del estudio realizado sobre la evolución temporal de la emisión gamma de dicha desexcitación.

Estos resultados sobre el esquema de niveles de baja energía del núcleo ^{72}Br nos han permitido afrontar el análisis de las medidas realizadas con el TAS "Lucrecia" que actualmente se encuentra en curso. La distribución experimental de fuerza Gamow-Teller de nuestra desintegración será obtenida a partir de la distribución de la alimentación directa a niveles excitados en ^{72}Br por desintegración beta de ^{72}Kr . Este estudio completo de la desintegración beta del núcleo $N=Z$ ^{72}Kr constituye el trabajo principal de tesis del estudiante José A. Briz (becario Predoctoral-FPI).

REACCIONES DE TRANSFERENCIA EN HACES EXÓTICOS RICOS DE NEUTRONES EN REX-ISOLDE

Las reacciones de transferencia de un nucleón constituyen una herramienta excelente para el estudio de las propiedades mono-particulares de los estados nucleares. En particular, en dichas reacciones se obtienen datos experimentales esenciales para el estudio de la evolución de la estructura de capas, y de las energías efectivas mono-particulares, lejos de la línea de estabilidad beta. El Dr. R. Orlandi, miembro de nuestro grupo desde el junio 2010 (y que obtuvo un contrato de postgrado CPAN que empezó en enero 2011), está involucrado en el estudio de reacciones de transferencia en REX-ISOLDE. En estos experimentos se utiliza el acoplamiento de la matriz de detectores de silicio T-REX con los detectores de Germanio de MINIBALL. En 2011, R. Orlandi y A. Jungclaus participaron de forma activa en el montaje y funcionamiento de un experimento de este tipo: $^{72}\text{Zn}(t,p)^{74}\text{Zn}$, que tuvo lugar en octubre de 2011. Actualmente, R. Orlandi está llevando a cabo el análisis de los datos del experimento $^{78}\text{Zn}(d,p)^{79}\text{Zn}$, que se realizó en ISOLDE a finales del 2010 y los resultados preliminares ya han sido presentados en contribuciones orales a tres conferencias internacionales durante 2011 (ARIS – Leuven, NCNP – Stockholm, Rutherford Centennial Conference – Manchester).

EVIDENCIA DE UNA FASE DE ALINEACIÓN DEL SPIN DE PARES NEUTRÓN-PROTÓN EN LA ESTRUCTURA DE NIVELES DEL ^{92}Pd

En un experimento realizado en GANIL (Caen, Francia), se estudió por primera vez el esquema de excitación del núcleo ^{92}Pd , un núcleo extremadamente deficiente en neutrones, mediante una reacción de fusión-evaporación y utilizando el espectrómetro gamma EXOGAM, la matriz DIAMANT de CsI para la detección de partículas cargadas y un "muro de neutrones", que es una matriz de 50 centelladores líquidos para la detección de neutrones. El objetivo del estudio fue investigar una pregunta que ha tenido una considerable atención en física nuclear – si un nuevo tipo de correlación entre pares de neutrones y protones ("isoscalar-pairing" donde el spin del protón y el del neutrón están totalmente alineados) podría aparecer en núcleos con igual número de neutrones y protones. En todos los núcleos estudiados hasta ahora, la estructura a baja energía se caracteriza generalmente por correlaciones entre pares de nucleones, por ejemplo pares de neutrones y pares de protones. Como se trata de partículas idénticas deben, de acuerdo con el principio de Pauli, tener alineación opuesta del spin. Dicha combinación da lugar a propiedades similares a las que se encuentran en el helio superfluido y en la superconductividad, como resultado del apareamiento de electrones en la física de la materia condensada. En la estructura de estados excitados que se ha identificado en el isótopo de Paladio ^{92}Pd , los neutrones y protones del sistema se encuentran en parejas de spines alineados, dando lugar a propiedades completamente diferentes comparado con las que uno tendría en un núcleo atómico "normal". La interpretación de los datos experimentales ha sido realizada mediante cálculos microscópicos en el marco del modelo de capas. Dichos cálculos sugieren para los núcleos pesados con $N=Z$ una imagen completamente diferente de lo que había sido propuesto en modelos teóricos anteriores del apareamiento neutrón-protón. Los resultados del experimento han sido publicados en 2011 en *Nature* (B. Cederwall et al.).

MEDIDA DE MOMENTOS MAGNÉTICOS CON HACES ESTABLES (UNILAC, GSI) Y EXÓTICOS, RICOS EN NEUTRONES (REX-ISOLDE)

Los momentos magnéticos son una prueba sensible de las propiedades mono-particulares en el núcleo. Pueden ser medidos mediante la observación de la perturbación inducida por un campo magnético en la correlación angular de los rayos gamma emitidos en la de-excitación del estado nuclear de interés. Medidas de momentos magnéticos fueron de importancia primordial en el desarrollo de la estructura nuclear y han sido y siguen siendo esenciales para poner a prueba el poder predictivo del modelo de capas nuclear. En 2011 publicamos los resultados de los últimos avances en las mediciones de momentos magnéticos de los isótopos estables de Estaño usando la técnica de campos transitorios (transient fields, TF) en combinación con la excitación Coulombiana en cinemática inversa (A. Jungclaus et al., PLB; J. Walker et al., PRC; J. Walker, Tesis doctoral, Universidad Autónoma de Madrid, mayo 2011). Los factores g de los estados excitados 2^+ en la serie de isótopos del estaño, determinados con una precisión sin precedentes, permite discriminar entre un número de diferentes aproximaciones modernas del modelo de capas y por lo tanto arrojar luz sobre el desarrollo de colectividad en la cadena semi-mágica de los isótopos de estaño.

Si bien la técnica TF está bien establecida en relación con haces de iones estables, el desarrollo de haces radioactivos plantea nuevos desafíos experimentales. Nuestro grupo pretende desafiar estos retos con la intención de superar ciertas limitaciones inherentes mediante la construcción de una nueva cámara de reacción, que fue desarrollada y construida en el IEM-CSIC. La nueva cámara alberga bobinas externas y el “yugo” para producir un campo magnético de 80 mT requerido para magnetizar la capa ferromagnética de Gd del blanco y un circuito de refrigeración de nitrógeno líquido para mantener su temperatura muy por debajo de la temperatura de Curie. En noviembre de 2011 A. Jungclaus, A. Illana, A. Perea, J.A. Briz y R. Orlandi, en colaboración con investigadores de otros institutos de investigación europeos, ejecutamos la primera parte del experimento IS483 en REX-ISOLDE, CERN, con el objetivo de medir el momento magnético del estado excitado 2^+ del ^{72}Zn . Los datos obtenidos están siendo analizados por A. Illana en el marco de su trabajo de tesis doctoral y se completará el experimento con los turnos de haz restantes en 2012. Esta medida pionera nos permitirá poner a prueba los cálculos del modelo de capas que describen mejor esta región de la tabla nuclear.

LA ASIMETRÍA DE REFLEXIÓN EN NUCLEÍDOS LIGEROS DEL ACTÍNIDO USANDO EL TRAZADO DE LA RADIACIÓN GAMMA DE LA MATRIZ DE DETECCIÓN AGATA

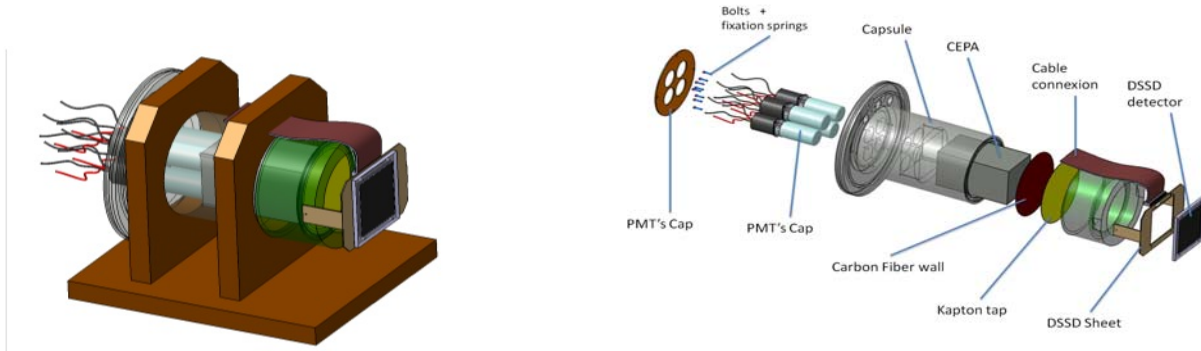
La asimetría de reflexión y la deformación octupolar son propiedades nucleares bien definidas y han sido observadas tanto en núcleos medios como pesados a lo largo de la tabla nuclear. Sobre dicho tema, hemos participado en un experimento en los Laboratori Nazionali di Legnaro (Legnaro, PD, Italia) en marzo de 2011, para caracterizar nuevas estructuras con deformación octupolar observadas en núcleos ligeros de los actínidos ^{220}Ra y ^{222}Th . El principal objetivo del experimento era medir la polarización lineal de las transiciones gamma que unen nuevas bandas rotacionales, que aún no se han dado a conocer, con el estado fundamental. En dicho experimento se empleó el demostrador de AGATA, una matriz de cinco grupos triples de detectores segmentados de germanio, que ofrece una sensibilidad sin precedentes, en resolución y eficiencia mediante la explotación de su capacidad de trazado. Con el demostrador de AGATA, las posiciones de interacción de los rayos gamma pueden ser empleadas para la reconstrucción de los ángulos de dispersión de las transiciones de interés, y por lo tanto determinar su polarización lineal. En dicho contexto es importante mencionar que en 2011, la colaboración AGATA, de la el grupo experimental de física nuclear del IEM es miembro, revisó los logros alcanzados en el proyecto AGATA en los últimos años, incluyendo toda la infraestructura necesaria para operar y apoyar el espectrómetro, en un extenso artículo (33 páginas) publicado en *Nuclear Instruments and Methods A*.

I+D PARA EL EXPERIMENTO R3B EN LA FUTURA INSTALACION FAIR

El experimento R3B es parte de la primera fase del proyecto FAIR. La configuración experimental de R3B está diseñada para la detección en cinemática completa de los productos emitidos en las reacciones a energías relativistas. El Calorímetro para la detección de rayos gamma emitidos en vuelo (CALIFA) se sitúa en torno al blanco de reacción y debe ser capaz de llegar a la necesaria resolución angular y resolución energética para detectar cascadas de rayos gamma de 1 a 10 MeV con un fuerte corrimiento Doppler debido a la alta velocidad de la fuente, así como para detectar protones de hasta 300 MeV. Nuestra participación en el I+D está centrado en contribuir a la construcción de este calorímetro.

A lo largo de 2011 se ha fijado el diseño de la parte del barril del calorímetro CALIFA y entregado un Informe de Diseño Técnico (TDR) en diciembre de 2011 al comité de evaluación. El grupo de Madrid ha desarrollado, en colaboración con la empresa Mesytec un sistema de control de temperatura y voltaje a nivel de la etapa preamplificadora con el fin de estabilizar los diodos LAPD muy sensibles a la captación de luz. El preamplificador se ha adaptado para manejar un gran rango dinámico de energía a cubrir mediante el método de “Time-Over-Threshold” donde se mide el tiempo de la señal que supera un cierto umbral. El sistema completo ha sido diseñado para adaptarse al encapsulado de cristales específicos y las uniones se han diseñado de modo que los preamplificadores con estabilización de voltaje y temperatura se montan directamente en los cristales.

En el diseño del casquete delantero de CALIFA estamos probando una solución innovadora con dos cristales centelleadores acoplados uno tras otro en lo que se llama configuración phoswich con un sistema único de lectura, ver la memoria 2010. Los experimentos realizados con el primer prototipo LaBr-LaCl phoswich están completamente analizados y el resultado obtenido se reproduce perfectamente mediante las simulaciones GEANT4 que hemos realizado. Estos resultados se recogen en un artículo enviado a Nuclear Instrument and Methods A y titulado “*A high Resolution Phoswich: LaBr₃(Ce) coupled with LaCl₃(Ce)*”. Basado en los resultados obtenidos se ha diseñado, simulado, y construido un prototipo CEPA (CALIFA Endcap Phoswich Assembly) consistente en un cluster de 4 cristales de 2x2 de 4 cm de largo LaBr(Ce), junto con uno de 6 cm de largo LaCl(Ce) en configuración de sandwich. Este prototipo se recibió en diciembre de 2011 y actualmente se está montando en una estructura de soporte especialmente diseñada para ello, ver figura. Durante el año 2012 se llevará a cabo una completa caracterización y evaluación de este detector phoswich.



El detector CEPA (CALIFA Endcap Phoswich Assembly) montado en soporte de metacrilato para su caracterización en el laboratorio. A la derecha detalle del conjunto de los elementos que integran CEPA montado en nuestro laboratorio.

En el perfeccionamiento de la herramienta de simulación R3BRoot, se ha incorporado el casquete delantero del calorímetro CALIFA, que se adapta perfectamente a la parte azimutal o barril. Este diseño es independiente de la elección final del material del cristal. Se ha diseñado de tal forma que la parte frontal CEPA pueda funcionar como un detector individual o integrado con dicho barril. El objetivo de este diseño es su optimización, con una mínima cantidad de material insensible y un mínimo número de formas y tamaños de los cristales, de tal forma que se minimicen los costes en la posterior fabricación (especialmente atendiendo al coste del cristal y a su electrónica asociada). Su diseño tiene forma de disco circular y está formado por 750 cristales agrupados en 10 paquetes iguales de 75 cristales separados en 5 alveolos de 15 cristales. Es más, como el tamaño del cristal en dirección polar ha de adaptarse al aumento de energía, "Boost de Lorentz", de la radiación gamma emitida por la fuente en movimiento a velocidades muy altas, dicho casquete se divide en múltiples segmentos (altas granularidad). En la configuración actual está formado por 15 anillos, cada uno con diferente dirección polar en función de la resolución en energía esperada ($k=3.75\%$). Los cristales son pirámides truncadas de base rectangular con sus aristas dependientes del cambio de ángulo polar, de tal forma que la parte delantera se adapte al incremento en energía asociada a la transformación de Lorentz característica de velocidades relativistas de la fuente emisora de la radiación gamma. El volumen total insensible a la radiación (incluido el recubrimiento protector) es del 15%.

DIAGNÓSTICO DE HAZ PARA HIE-ISOLDE

La doctora Francesca Zocca, financiada por el CPAN ha trabajado en nuevos desarrollos para el diagnóstico de haz para el proyecto de mejora del acelerador de haces radioactivos REX-ISOLDE llamada HIE-ISOLDE ya que supone una mejora en energía, intensidad y calidad del haz radioactivo de ISOLDE. Dentro de este proyecto la Dra. Zocca se ha encargado de desarrollar un monitor de estado sólido para colocarlo en el haz tras los módulos superconductores (SC). En particular, se ha desarrollado un prototipo de monitor de silicio y se ha testeado con éxito para su utilización tras los módulos criogénicos SC, con el objeto de medir la energía de haz y medidas de tiempo destinadas a la sincronización de la fase de la cavidad SC. Las medidas de energía realizadas en REX permitieron realizar el estudio espectroscópico del haz y la identificación del ión con una resolución de 1.4 a 0.5% rms en el rango de energía de REX entre 300 keV/u y 3 MeV/u. El perfil de tiempo del haz, caracterizado por un periodo del tren de pulsos de 9.87 ns, se ha medido con una resolución mejor de 200 ps rms. Las resoluciones alcanzadas son adecuadas para un rápido ajuste de la fase de las cavidades, probada en REX mientras se hacían las medidas de energía y tiempo de vuelo. Estos trabajos de I+D han dado lugar a dos artículos enviados a la revista Nuclear Instrument and Methods A en diciembre 2011 (doi:10.1016/j.nima.2011.12.089; doi:10.1016/j.nima.2011.10.014).

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

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

que no se produzca la ruptura de enlace químico de la molécula (fisisorción), el estado termodinámico es tal que no se puede conseguir una retención substancial de las moléculas sobre el substrato adsorbente. Como quiera que la retención mediante enlace químico (quimisorción) implicaría temperaturas demasiado altas en la práctica para volver a liberar el hidrógeno es necesario pensar en mecanismos de atrapado microscópico más allá de los presentes en los adsorbentes habituales.

Mediante el uso concurrente de técnicas de dispersión de neutrones y medidas de adsorción hemos podido identificar algunos mecanismos que contribuyen a aumentar substancialmente la capacidad de almacenamiento de los correspondientes adsorbatos. Más concretamente, hemos podido observar un proceso de atrapado cinético de las moléculas de H₂ en determinadas estructuras carbonosas de haces tubulares. En el proceso de llenado, la estructura se va expandiendo, lo que por una parte aumenta su capacidad nominal de almacenamiento según aumenta la presión, mientras que, por otro, las moléculas quedan en parte cinéticamente atrapadas en la estructura de tal forma que al volver a bajar la presión un exceso de ellas queda retenido en la estructura dando lugar un ciclo de histéresis en el proceso de adsorción/desorción.

Siguiendo la misma filosofía hemos empezado a estudiar materiales basados en óxido de grafito. Hemos tenido éxito en el intercalado de moléculas simples de tal forma que se puede “sintonizar” el espaciado interlaminar así como la tortuosidad de los poros entre “pilares”. Esperamos así, conseguir materiales que “atrapen” eficientemente moléculas relevantes, en particular H₂.

ESTRUCTURA Y DINÁMICA MICROSCÓPICA DE MATERIA CONDENSADA DESORDENADA

La riqueza de estructuras microscópicas de la materia condensada va mucho más allá de las tradicionales fases cristalinas (sólido ordenado), vidrio (sólido desordenado) y líquido (fluido). Sustancias molecularmente sencillas como los alcoholes simples (Metanol, Etanol, Propanol,...) presentan fases con diferentes tipos de ordenamiento espacio-temporal en diferentes grados de libertad. Probablemente el ejemplo más destacable es el etanol en el que aparte del cristal, vidrio y líquido convencionales puede adoptar una fase de vidrio orientacional con los grados de libertad traslacionales ordenados en un cristal bcc mientras que los orientacionales están en una fase vítrea desordenada. Estos grados orientacionales pueden a su vez se “funden” a una determinada temperatura y rotar alrededor de los centros de masas moleculares ordenados cristalinamente. En este contexto, haciendo uso de técnicas de difracción de neutrones, estamos estudiando la cinética de la transición entre esta fase cristalina rotora (cristal plástico) y el cristal monoclinico estándar.

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

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

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

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

NANOFABRICACIÓN

La fabricación de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas con vistas a sus aplicaciones espectroscópicas ha constituido una línea prioritaria en este periodo. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos con alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs con morfologías de gran intensificación de campo, como nanoprismas triangulares y nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales que dan lugar a la formación de cavidades interpartícula altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Se han ensayado protocolos de preparación de NPs diferentes a los encontrados en la literatura científica con vistas a las aplicaciones espectroscópicas de estos sistemas. El ensamblaje de NPs se ha llevado a cabo empleado como moléculas bifuncionales diaminas, ditiolos, dicarboxilatos alifáticos así como ditiolos aromáticos. La caracterización de estos sistemas se ha llevado a cabo mediante resonancia de plasmones, TEM y Espectroscopía SERS y SEF.

Dentro de esta línea se ha procedido a la fabricación de sistemas metálicos mixtos core/shell donde se combinan las propiedades plasmónicas de ambos metales, preservándose en la superficie las características del metal de la capa más externa. Concretamente se han fabricado con éxito sistemas Au/Ag y Au/Pt por reducción de Ag y Pt sobre nanopartículas de Au, respectivamente. Estos sistemas se han caracterizado mediante resonancia de plasmones y microscopía óptica y electrónica y SERS. El empleo de sistemas moleculares marcadores o sondas, que se adsorben de manera distinta sobre los distintos metales de la capa más externa, ha permitido obtener una valiosa información acerca de la distribución de los metales en las partículas resultantes, así como determinar su efectividad en SERS.

Dentro de esta línea también, se ha continuado con la fabricación de sistemas core/shell consistentes en nanopartículas magnéticas recubiertas de Ag y Au, dando lugar a sistemas donde las propiedades plasmónicas de los metales empleados para la cubierta (shell) se combinan con las magnéticas del núcleo de magnetita (core). Estos sistemas han sido caracterizados mediante técnicas como espectroscopía de absorción UV-visible, IR y Raman, microscopía TEM, difracción de Rayos X y medidas de magnetización.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

Gran parte del trabajo realizado durante 2011 en esta línea de investigación, se ha dedicado a la funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras formadas, permitiendo la obtención de 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 permiten que las NPs sean biocompatibles, de gran interés en aplicaciones médicas, y controlan el autoensamblaje de estos sistemas.

La funcionalización de NPs se ha llevado a cabo mediante receptores provistos de cavidades, como los calixarenos y ciclodextrinas. En ambos casos se ha llevado a cabo la modificación química de estos receptores con grupos químicos que presentan una alta afinidad por las superficies metálicas, tales como el grupo ditiocarbamato (DTC), que es uno de los grupos más afines por estos metales. La derivatización de estos ciclos con DTC ha permitido aumentar la eficacia en la funcionalización, dando lugar a sistemas metal/ensamblador con altas prestaciones en la detección de contaminantes, fármacos y dopantes empleados ilícitamente en el deporte. La detección de estos analitos es posible gracias a la existencia de cavidades hidrofóbicas en estos receptores, en los que se pueden alojar las moléculas que se pretende detectar, permitiendo así un acercamiento de los mismos a la superficie de las NPs. Dicho acercamiento es la condición necesaria para obtener intensos espectros SERS. Recientemente se ha empezado también a usar moléculas ensambladoras de inclusión como los cucurbituriles en la detección de pesticidas.

Otro grupo de moléculas empleadas en la funcionalización de NPs son los “viológenos², cuya actividad para albergar otras moléculas está relacionada con su capacidad como aceptor de electrones, se han usado para la detección de hidrocarburos policíclicos aromáticos, que actúan como donadores de electrones. Así, se han obtenido NPs funcionalizadas con lucigenina para la detección de mezclas de hidrocarburos. El carácter altamente selectivo de los espectros SERS ha permitido la identificación de cada uno de los componentes a través de sus bandas características. Los “viológenos bifuncionales” mejoran extraordinariamente las prestaciones de estas sustancias al ser creadores de espacios interpartícula con alta intensificación de campo electromagnético actuando como ensambladores moleculares de contacto. Estos trabajos se han realizado en el marco de la Unidad Asociada de nuestro grupo con la Universidad de Málaga.

Finalmente, también se ha estudiado la funcionalización de NPs mediante moléculas bifuncionales de carácter alifático (diaminas, ditiolos y dicarboxilatos), con el fin de detectar moléculas de estructura alifática, además de otras de carácter aromático (disulfuros y diisocianuros fenilénicos). Estas moléculas bifuncionales son capaces de

ensamblar NPs formando un espacio interpartícula con propiedades especialmente dotadas para la detección de compuestos aromáticos e inducir catálisis dirigida a sustratos localizados en estas cavidades. Estos trabajos se han realizado en el marco de las colaboraciones que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad P.J. Safarik de Kosice (Eslovaquia) y también con investigadores de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón).

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Se ha ensayado también la funcionalización de NPs con biomoléculas para conferirles una mayor biocompatibilidad. En concreto, se ha llevado a cabo un estudio de la adsorción de péptidos de secuencia variada y con características de polaridad e hidrofobicidad diferentes con el fin de evaluar afinidades con las superficies metálicas. En particular, el estudio se ha centrado en la adsorción de cisteína y cistina, dos aminoácidos con grupos tioles y puentes disulfuro, respectivamente, en presencia de Ag y Au. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con investigadores de la Universidad de Paris XIII (Francia).

Relacionado con este tema, se ha estudiado la adsorción de proteínas (albúmina humana y bovina, así como la mioglobina, importante proteína relacionada con el transporte y almacenamiento de oxígeno en músculo) sobre metales. Con el fin de aumentar la afinidad de péptidos y proteínas por las superficies metálicas empleadas en SERS, se ha procedido a la funcionalización de éstas mediante polisacáridos que presentan una gran afinidad por los metales, como es el caso del quitosano y el alginato. Este trabajo se ha realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Chile y de la Universidad de Florencia.

Se ha continuado con el análisis estructural de materiales biológicos de difícil caracterización mediante técnicas espectroscópicas convencionales. En este terreno se ha llevado a cabo un estudio de la adsorción sobre NPs metálicas de sustancias húmicas y melaninas resultantes de procesos de digestión inducidos por hongos. En particular, se ha llevado a cabo una caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) tanto sobre NPs de Ag como sobre electrodos metálicos, con el fin de estudiar el efecto del potencial aplicado sobre los espectros SERS y SEF de estas sustancias. Finalmente, se ha realizado un estudio de la estructura de la materia orgánica extraída de terrenos forestales que han sufrido un incendio mediante el empleo de NPs de Ag. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de las Universidades de Bolonia y Florencia.

En colaboración con el Departamento de Biofísica de la Universidad P.J. Safarik de Kosice en Eslovaquia, se ha iniciado un estudio basado en la aplicación de NPs metálicas a la caracterización estructural de sustancias naturales antraquinónicas con posibles propiedades antitumorales. Este estudio se ha centrado en el pigmento parietina, presente en los líquenes de la especie *Xanthoria parietina*, habiéndose realizado también un análisis de la distribución del pigmento en las hojas de estos líquenes mediante la técnica de imagen Raman.

También se ha llevado a cabo la caracterización vibracional del colorante tioflavina mediante espectroscopia SERS y SEF. Este colorante es capaz de interactuar con proteínas amiloideas permitiendo su detección en pequeñas cantidades. Así, se ha estudiado la interacción del mismo con β -amiloide, proteína relacionada con el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer, lo que permitiría la detección precoz de esta enfermedad.

FLUORESCENCIA INTENSIFICADA POR SUPERFICIES METÁLICAS

Durante este último periodo se ha continuado con la aplicación de la técnica SEF (Surface-enhanced Fluorescence) sobre NPs en suspensiones coloidales. Este método ha permitido seguir progresando en el estudio de la adsorción y agregación de fármacos, especialmente el fármaco antitumoral emodina, y el fármaco anti-inflamatorio piroxicam sobre nanopartículas metálicas.

Asimismo, se ha encontrado que la funcionalización de nanopartículas metálicas es crucial en SEF, ya que la intensificación de la fluorescencia requiere de un cierto distanciamiento del fluoróforo respecto al metal. Se ha visto que la interacción de estos fármacos con albúmina da lugar a una consiguiente intensificación de los espectros SEF, que conjuntamente con los espectros SERS, los espectros de dicroísmo circular y los de fluorescencia de vida media, han dado lugar a importantes resultados sobre los cambios estructurales que sufren estos sistemas una vez adsorbidos sobre la superficie metálica.

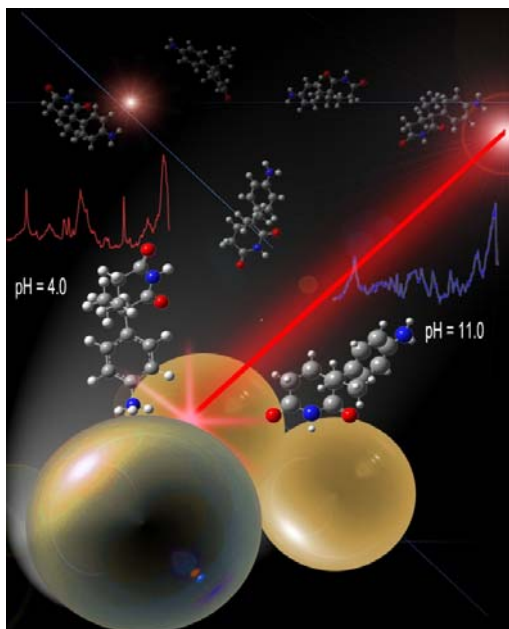
En particular, se ha estudiado el porcentaje de atenuación de la fluorescencia que sufre el fármaco en el complejo con albúmina y en presencia de NPs de Ag por efecto de atenuación estática y dinámica.

Dentro de los objetivos del proyecto MICROSERES financiado por la Comunidad de Madrid se ha comenzado una colaboración con un grupo de la UAM para el diseño de nuevos sistemas de liberación controlada de fármacos basados en silicio poroso. Los primeros resultados obtenidos han sido satisfactorios y se han detectado el

antitumoral emodina mediante el efecto SEF tras la utilización de un nuevo método de infiltración diseñado por nosotros

Esta línea de investigación está a cargo de la Prof. M^a Paz Sevilla (F. de Farmacia, UCM).

NANOSENSORES SERS APLICADOS EN LA DETECCIÓN DE FÁRMACOS EMPLEADOS EN DOPAJE DEPORTIVO



Se ha avanzado notablemente en la línea de investigación consistente en la aplicación de la técnica SERS a la caracterización de fármacos empleados en dopaje deportivo (FEDD). Se han obtenido importantes resultados correspondientes al estudio SERS de los β -agonistas clenbuterol, salbutamol y terbutalina, así como de aminoglutetimida, inhibidor de aromataasa empleado en deportistas para evitar la pérdida de masa muscular. El empleo de NPs de Ag con forma de prismas triangulares ha permitido mejorar de forma sensible el límite de detección de estos compuestos hasta niveles nunca antes detectados mediante las técnicas convencionales. En este sentido, se ha realizado un estudio comparativo de la eficacia de NPs con diferente naturaleza y morfología.

*Adsorción y Detección del fármaco **aminoglutetimida** sobre nanopartículas de oro empleando un láser a 632.8 nm en diferentes condiciones de pH.*

Asimismo, las bandas características de los espectros vibracionales de cada molécula permiten llevar a cabo un análisis de multicomponentes o mezclas de estos dopantes. Para ello, ha sido necesario realizar previamente un estudio teórico de los modos vibracionales y un seguimiento de las isotermas de adsorción de los fármacos investigados sobre NPs metálicas. Este estudio ha permitido obtener rectas de calibración, a partir de las cuales es posible deducir importantes parámetros estructurales de estas moléculas, como la constante de adsorción, el límite de detección, el coeficiente de intensificación SERS y la señal máxima SERS medible.

También se ha detectado el dopante nandrolona, un FEDD que no se puede detectar directamente sobre NPs. El análisis de los espectros ha permitido obtener información estructural importante acerca de los mecanismos de interacción entre el agente ensamblador el ligando y la superficie. Este resultado ha dado pie a la solicitud de una patente que se encuentra actualmente en fase de consideración por parte de la Oficina de Transferencia de Tecnología del CSIC. Todos estos resultados forman parte de la tesis doctoral de Irene Izquierdo.

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

Dentro de esta línea de investigación se ha continuado con la aplicación de espectroscopías SERS y SEF al estudio de pigmentos orgánicos sintéticos de altas prestaciones, que forma parte de la tesis doctoral de Elena del Puerto. Los pigmentos investigados en este estudio han sido fundamentalmente derivados de la quinacridona. Estos compuestos son altamente refractarios y durables debido, entre otras cosas, a su alta insolubilidad en medio acuoso, lo que dificulta notablemente su caracterización mediante técnicas espectroscópicas. Se han determinado las condiciones óptimas para llevar a cabo la dispersión de estas moléculas, para lo que se han ensayado métodos de funcionalización con calixarenos de distinto tamaño (de 4 y 8 anillos bencénicos), encontrándose una estrecha correlación entre la cavidad de la molécula receptora y el pigmento. La adsorción de estas moléculas mediante películas Langmuir-Blodgett ha permitido también su caracterización, así como un estudio de la variación de la emisión SERS y SEF en función de la distancia de la molécula de pigmento a la superficie. Además, se han estudiado otros dos pigmentos derivados de quinacridona de interés en el desarrollo de sistemas OLED (Organic Light Emission Diodes): dimetilquinacridona y dicloroquinacridona, cuya caracterización se ha llevado a cabo mediante los correspondientes espectros SERS y SEF. En algunos casos fue necesario el uso de dispersantes como líquidos iónicos de naturaleza alquímica e imidazólica y también diaminas alquímicas para llevar a cabo la dispersión y acercamiento de los pigmentos estudiados a la superficie.

La espectroscopía Raman y la técnica SERS también han sido aplicadas en el estudio de pigmentos contenidos en manuscritos islámicos antiguos procedentes de Marruecos. En este sentido la aplicación de la técnica SERS ha sido de gran utilidad en la identificación de los pigmentos rojos y amarillos de naturaleza orgánica, que no pueden ser caracterizados mediante técnicas convencionales debido a la alta emisión de fluorescencia de estos colorantes. De los espectros SERS obtenidos, se ha podido identificar la presencia de carmín en tintas de coloración rojo rosado y también en tintas negras con matices rojizos. Este trabajo se ha realizado gracias a un convenio bilateral de colaboración CSIC-CNRST con investigadores de la Universidad Moulay Ismail de Meknes en Marruecos.

La técnica SERS ha sido empleada en la caracterización de sustancias residuales de coloración oscura encontradas en la cueva de Lascaux (Francia). Estas sustancias son producidas por la acción combinada de microorganismos sobre las pinturas que se encuentran en las paredes de dicha cueva. La técnica SERS ha permitido la identificación de dichos compuestos, gracias a la atenuación de la fluorescencia, permitiendo deducir la estructura de esos materiales y así poder entender los orígenes de dicha degradación. Este trabajo ha sido realizado en colaboración con el Prof. C. Sáiz-Jiménez del IRNAS (CSIC).

Se ha aplicado también la espectroscopía Raman a la caracterización de aditivos moleculares orgánicos tradicionales y comerciales utilizados en materiales de construcción de interés para el Patrimonio Histórico. Mientras que los aditivos tradicionales (huevo, azúcares, etc) presentan estructuras conocidas, las estructuras de los aditivos comerciales son muy complejas, al ser mezcla de varios compuestos y por lo tanto de difícil interpretación. La modificación del proceso de hidratación de los ligantes tradicionales con diferentes aditivos se ha estudiado por espectroscopía Raman, analizando las diferentes formas polimórficas del CaCO_3 originadas por la presencia del aditivo. Con respecto a los aditivos comerciales se sigue trabajando en la obtención de los espectros SERS de los mismos para su posterior identificación en materiales endurecidos.

La valorización de residuos de las plantas potabilizadoras de agua y de la industria papelera como materia prima para la obtención de nuevos materiales se realiza en colaboración con el Departamento de Síntesis, Caracterización y Reciclado de Materiales del Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja del CSIC. En el caso de la utilización de pulpa de papel se han identificado a través de espectroscopía Raman nuevas fases cristalinas tipo hidrotalcitas.

Finalmente, se está trabajando en colaboración con el grupo de Espectroscopía de Plasmas de Ablación de este Departamento en la obtención de vidrios sintéticos (fulguritas) en materiales de construcción de base silicio mediante la aplicación de Láseres continuos y pulsados y su posterior identificación mediante técnicas de ablación láser (LIBS) y espectroscopía Raman. Resultados preliminares muestran que irradiando con láseres continuos de CO_2 se generan fulguritas de composición análogas a las que aparecen en la naturaleza.

BIOESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN

Se ha continuado con la medida de espectros infrarrojos y Raman de fracciones sanguínea de sesenta sujetos, cuarenta y tres de ellos afectados por la enfermedad de Alzheimer y el resto controles sanos. Tras el tratamiento matemático de espectros para su normalización y corrección de líneas de base, se ha realizado análisis multivariante, en particular análisis discriminante, curvas ROC y redes neuronales multicapa para clasificaciones de muestras. En la fracción de leucocitos mononucleares se han obtenido clasificaciones con 85% aproximadamente de sensibilidad y especificidad, generada por bandas infrarrojas amida I de estructura proteica en lámina- β . Resultados similares se han obtenido mediante los espectros infrarrojos de la fracción de plasma considerando la región amida I y la comprendida entre $1150\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$ que contiene bandas de tensión de grupos CO de alcoholes y peróxidos generados por estrés oxidativo característico de esta enfermedad. Por otra parte, el análisis multivariante de la región Raman $800\text{-}350\text{ cm}^{-1}$ de esta fracción permite clasificaciones de muestras de plasma sanguíneo con aproximadamente 90% de sensibilidad y especificidad, debido a diferencias espectrales originadas por estructura terciaria de cadenas laterales proteicas de triptófano.

ESTRUCTURA DE SISTEMAS BIOLÓGICOS EN ALIMENTOS

En colaboración con el Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN, CSIC) se ha realizado un estudio sobre aplicaciones de la espectroscopía FTIR para determinar las estructuras de lípidos y proteínas y sus posibles interacciones en la formación de diversas emulsiones de aceite de oliva en agua. En particular se han estudiado emulsiones estabilizadas con proteína de soja y otras emulsiones estabilizadas con esta proteína, caseinato sódico y transglutaminasa. Una relación entre las propiedades texturales y estructurales proteolípicas resultó ser dependiente del sistema proteico estabilizador usado en estas emulsiones.

FORMULACIÓN DE SCATTERING DE ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS (3D) DE INTEGRALES DE SUPERFICIE

Esta formulación ha sido desarrollada sobre la base de las ecuaciones de Stratton-Chu, para un sistema de dispersores con formas arbitrarias y respuesta dieléctrica variada. El código se ha elaborado para dispersores con formas arbitrarias, gracias a la implementación de superficies flexibles (usando ahora, en particular, la versión 3D de la superfórmula de Gielis). Las pruebas han reproducido de manera satisfactoria los resultados conocidos: los patrones de dispersión de Mie para una sola esfera, la teoría extendida de Mie de dímeros de esferas, así como resultados de otros métodos comerciales (FDTD, DDA) para formas complejas (nanocubos).

SERS SOBRE NANOESTRELLAS

Hemos investigado teóricamente las propiedades ópticas asociadas a los plasmones de superficie localizados de Ag nanopartículas conocidas como nanoestrellas 3D sin simetría axial (modelado por una Supershape). Se ha comprobado que en resonancia aumenta notablemente la intensidad de campo en las puntas, que hacen que estas nanoestrellas estén especialmente indicadas como sustratos para espectroscopía SERS (por efecto de cada nanopartícula aislada, sin agregación). Además, hemos demostrado, explotando algoritmos genéticos de optimización, que tales formas, entre una variedad de ellas, soportan plasmones de superficie localizados que maximizan las secciones eficaces de extinción.

PLASMONES DE SUPERFICIE EN M EFECTIVA <0 ($\epsilon > 0$) METAMATERIALES

Se han investigado las propiedades ópticas de los medios de comunicación con la respuesta negativa magnética ($\mu < 0$), que se extiende el formalismo de la dispersión del teorema de Green para incluir una discontinuidad en la μ permeabilidad magnética (isotrópico y homogéneo), con especial énfasis en el fenómeno de la retrodispersión mejorada debido a la excitación de plasmones de superficies polarizadas. También en relación con los metamateriales, nuevas nanoestructuras de metal-dieléctrico se han propuesto.

NANOESTRUCTURAS METALO-DIELÉCTRICAS PARA METAMATERIALES

Se ha propuesto un esquema simple basado en una sola nanopartícula con núcleo de metal y recubrimiento dieléctrico de alta permitividad, responsables respectivamente de la respuesta eléctrica y magnética, por lo tanto intrínsecamente isotrópica e independiente de polarización. Por otra parte, ya que el mecanismo físico se basa en la respuesta de nanopartículas individuales desacopladas, no se necesita ninguna distribución particular de las mismas. De hecho, nos muestran que un comportamiento realista como medio NIM de índice de refracción negativa (isótropo y 3D) es factible para silicio o el germanio en el infrarrojo (frecuencias de 1,2 a 1,55 μm). Creemos que los resultados presentados pueden allanar el camino hacia posibles metamateriales ópticos diseñados sobre la base de la física que subyace nuestra configuración metalo-dieléctrica doblemente resonante. Estos principios físicos, por supuesto, pueden ser explotados a bajas (IR lejano y THz) frecuencias, a la que algunos materiales dieléctricos presentan índices de refracción muy grandes y ciertos materiales (por ejemplo, cristales polares, semiconductores dopados) se comportan como metales plasmónicos. Finalmente, debe hacerse hincapié en que los medios de fabricación requeridos pueden abrir una nueva ruta hacia la nanosíntesis de NIM.

ESPECTROSCOPIA DE PLASMAS INDUCIDOS POR LÁSER

Hemos estudiado el plasma formado en la ruptura dieléctrica inducida por láser del gas CO_2 a diferentes presiones mediante Espectroscopía Óptica de Alta Resolución. Las emisiones más intensas del plasma proceden de especies atómicas neutras, O y C, e ionizadas, O^+ y C^+ . Las emisiones de media intensidad son debidas a la relajación electrónica de diversas especies, C^{2+} , O^{2+} , N^+ , N, H, y diversos sistemas de bandas moleculares, C_2 , CN, O_2 , O_2^+ , N_2 y N_2^+ . Se obtuvieron el umbral de ruptura dieléctrica, temperatura del plasma y las distribuciones de velocidad para diversas especies. Se estimó la densidad electrónica en el plasma y a partir de los perfiles de intensidad en tiempo de vuelo (TOF) se obtuvieron las correspondientes constantes de recombinación electrón-ión a tres cuerpos para distintas especies. Se ha estudiado la espectroscopía del plasma formado por la ruptura dieléctrica del He a diversas presiones. El espectro es debido principalmente a relajaciones electrónicas de He, He^+ y H excitados. Las características del plasma fueron examinadas mediante Espectroscopía de Emisión óptica integrada y resuelta en el tiempo. Se obtuvieron el umbral de ruptura dieléctrica, grado de ionización y temperatura del plasma. A partir de las medidas de tiempo de vuelo se determinaron las distribuciones de velocidad y energía cinética para las especies He y He^+ . La densidad electrónica y su evolución temporal se utilizaron para la determinación de las constantes de recombinación electrón-ion a tres cuerpos.

Se realizó una revisión de los fundamentos de LIBS y de diversos estudios experimentales en gases, tales como nitrógeno, oxígeno y aire obtenidos en nuestro laboratorio, para su publicación como un capítulo de un libro. Se revisaron los diferentes procesos físicos que gobiernan la ruptura dieléctrica en gases y se midieron experimentalmente parámetros como el umbral de ruptura o temperaturas de excitación. A partir del ensanchamiento Stark de diversas emisiones iónicas se obtuvo la densidad electrónica. A partir de las gráficas de tiempo de vuelo se

obtuvieron las distribuciones de velocidad y de energía cinética. La densidad electrónica y su evolución temporal se utilizaron para la determinación de las constantes de recombinación electrón-ión a tres cuerpos. Estos trabajos se han realizado en colaboración con los Profesores J.J. Camacho y J.M. Poyato (Departamento de Química Física de la UAM).

PLASMAS DE ABLACIÓN INDUCIDOS POR RADIACIÓN LÁSER INFRARROJA

Se ha estudiado la ablación de blancos de grafito inducida con láseres de CO₂. Se analizó la pluma de ablación con resolución espacial y temporal. El espectro de dispersión de la pluma muestra la emisión de C, C⁺, C₂⁺, C₃⁺, C₄⁺, N, H, O, N⁺, O⁺ y sistemas moleculares correspondientes al C₂, CN, OH, CH, N₂ y NH. Se estimaron las diferentes temperaturas, excitación, vibracional y rotacional, así como el grado de ionización y la densidad electrónica para diferentes especies. Este trabajo ha sido publicado como libro completo. Se ha aplicado la Espectroscopia de Emisión Óptica resuelta en el tiempo a la pluma de ablación de blancos de germanio. Se estudió el comportamiento temporal de átomos neutros de Ge y de algunas especies ionizadas como Ge³⁺, Ge²⁺, and Ge⁺. A partir de las medidas de tiempo de vuelo se pudo determinar sus distribuciones de velocidad y sus constantes de recombinación electrón-ión a tres cuerpos. Resultados previos de LIBS en diferentes muestras (He, Ge, GeH₄ and CO₂) han sido revisados para su publicación como capítulo de un libro.

Se ha iniciado el estudio de la ablación láser de TiO y Ti. La ablación se realizó en vacío y en atmósferas de benceno y hexano. Los resultados preliminares muestran una dependencia de las características de los depósitos obtenidos de la presión del gas, sin embargo, la espectroscopia de los plasmas de ablación no se ve afectada por este parámetro.

Estos trabajos se han realizado en colaboración con los Profesores J.J. Camacho y J.M. Poyato (Departamento de Química Física de la UAM) y la colaboración de Věra Jandová (Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic).

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física molecular de sistemas atmosféricos, astrofísicos y plasmas.
- Fluidodinámica Molecular.
- Espectroscopia Láser.
- Física Molecular Teórica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos.
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopia Raman en chorros supersónicos de gases.
- Coeficientes de transferencia de energía rotacional por colisiones moleculares.
- Solidificación molecular en microchorros criogénicos de líquidos.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopia de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP.
- Generación de plasmas fríos en descargas de gases a baja presión.
- Espectrometría de masas de iones y neutros con resolución de energía.
- Espectroscopia visible de emisión de plasmas.
- Sondas de Langmuir para medidas de energía electrónica y de densidad de carga.
- Espectroscopia Raman lineal.
- Chorros supersónicos de gases.
- Microchorros de líquidos subenfriados.

- Criogenia.
- Espectroscopía Raman Estimulada.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.
- Métodos computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en tres apartados que se indican a continuación.

Física molecular de sistemas atmosféricos y astrofísicos

Alrededor de 2006 empezamos una nueva línea dedicada al estudio de sistemas sólidos que pudieran servir de modelo de objetos astrofísicos. Desde esa fecha hemos trabajado sobre mezclas de hielos de agua, dióxido de carbono, metano y metanol, que son algunos de los más abundantes constituyentes de los núcleos de los cometas. Hemos estudiado estos sistemas por medio de espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas. Mediante una cámara de alto vacío y un nuevo criostato somos capaces de extender las medidas hasta unos 6 K, lo que nos permite acceder a un rango de temperaturas muy interesantes en el ámbito astrofísico. En los párrafos siguientes describimos en mayor detalle las contribuciones más relevantes obtenidas durante el año 2011.

Hemos iniciado una línea de investigación con cierta tendencia astrobiológica. La molécula de glicina se ha detectado en asteroides, y no existe hasta la fecha una investigación espectroscópica completa de esta especie en ambientes y condiciones físicas variadas. Por ello, hemos llevado a cabo un estudio espectroscópico de glicina en sus formas neutra e iónica, aislada y en entornos polares y no polares, y hemos analizado cambios en su estructura en un rango de temperaturas entre 25 y 200 K. Para el estudio de sólidos con baja presión de vapor, como la glicina, hemos diseñado un horno que permite volatilizar la muestra a vacío y depositar el vapor sobre un sustrato frío. Una nueva adición experimental nos permite rotar el sustrato a vacío para orientarlo frente al horno o frente a la radiación de infrarrojo. Esta línea se continuará aplicando a otras especies biológicas.

Otra especie de interés astrofísico es el ácido carbónico, que se supone existe en diversos ambientes, como en la atmósfera de Marte, o formando parte del coma de cometas. Hemos observado por primera vez esta molécula en fase gaseosa en el laboratorio, como parte de un estudio teórico y experimental realizado en colaboración con los Dres. Grothe y Lortiang, de las Universidades de Viena e Innsbruck respectivamente. Esta investigación ha recibido una notoria atención internacional, siendo anunciada en la página web del CSIC.

Dentro de la línea de interés astrofísico hemos estudiado la detección de agua deuterada y el intercambio isotópico D/H en hielos amorfos y cristalinos por debajo de 150 K. La distribución isotópica es una variable de gran interés para el conocimiento de las propiedades y evolución de los medios astronómicos. Se concluye de nuestras investigaciones que la proporción HDO/H₂O puede detectarse en un rango de entre unas pocas partes por ciento para muestras amorfas a partes por mil para hielo cristalino, utilizando la banda de vibración de tensión O-D como testigo. Estos límites relativamente altos y la gran dependencia de la forma de la banda con la temperatura complican seriamente la interpretación de datos provenientes de muchas líneas de observación. Por otra parte, hemos investigado también el ión formato, HCOO⁻, igualmente de interés astrofísico. Este ión se caracteriza por adoptar diferentes estructuras. Hemos estudiado el formato tanto aislado como en las sales de sodio y amonio. El estudio comprende cálculos teóricos y experimentales de espectroscopía de infrarrojo.

En la parte atmosférica de nuestra labor, hemos estudiado mezclas de ácido nítrico, clorhídrico y agua, en proporción variable, en colaboración con colegas de la U. Complutense y de la Universidad de Isparta (Turquía). Hemos predicho sus espectros de infrarrojo y sus características de transferencia protónica y enlaces de hidrógeno. Esto nos ha permitido clasificar estos agregados en términos de su fuerza de enlace de H y grado de ionización. Asimismo, en colaboración con colegas de Viena y del Reino Unido, hemos presentado un conjunto de resultados de aplicación de diferentes técnicas espectroscópicas al monohidrato de ácido nítrico, especie relacionada con otras de interés atmosférico. En esta línea también, se incluye un estudio teórico de las propiedades moleculares de enlaces de H y enlaces de halógeno en la molécula de yodo-tirosina, realizado en colaboración con colegas de la UCM y la UPM.

Por otra parte, continuamos la puesta a punto de una nueva cámara de flujo dedicada a la producción y estudio de aerosoles atmosféricos. La cámara está prácticamente lista y esperamos obtener los primeros resultados en 2012.

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

Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasmas-superficies

Se ha investigado experimental y teóricamente, con ayuda de modelos cinéticos elaborados por nosotros, el efecto que pequeñas variaciones de presión ejercen sobre las características de diferentes descargas de cátodo hueco con H_2 , mezclas de Ar/H_2 y aire. Se han observado cambios bastante abruptos en el intervalo de presiones estudiado, ~ 0.5 - 3 Pa, muy útiles para identificar los procesos fisicoquímicos clave en estos plasmas.

Se ha estudiado el efecto de intercambio isotópico en plasmas fríos a baja presión de H_2/D_2 generados en un reactor de descarga en cátodo hueco de acero inoxidable por espectrometría de masas de iones y neutros, y medidas de temperatura y densidad electrónica. Estos plasmas son de interés en dispositivos de fusión, química interestelar, y procesos tecnológicos de deposición de películas conteniendo hidrógeno. Los datos muestran buen acuerdo con el modelo. A la disociación de los precursores sigue el reciclado en pared, que regenera H_2 y D_2 y produce HD. Se ha encontrado que la recombinación atómica en pared ocurre mediante un mecanismo de Eley-Rideal, con preferencia para átomos de D en fase gas frente a H. Respecto a los iones, resultan dominantes H_3^+ , H_2D^+ , HD_2^+ y D_3^+ , producidos por reacciones entre iones y moléculas diatómicas.

Se ha investigado también la cinética de plasmas de $H_2 + 10\% N_2$ entre 0.8 y 8 Pa, usando las mismas técnicas del apartado anterior. El análisis de datos ha permitido identificar los principales mecanismos responsables de las distribuciones de neutros e iones encontradas y su evolución con la presión. En la química de neutros domina la formación de NH_3 (hasta un 70% del N_2 remanente) en las paredes metálicas mediante sucesivas hidrogenaciones de N y radicales nitrogenados. Para reproducir teóricamente los resultados obtenidos, es preciso incluir mecanismos de Eley-Rideal y Langmuir-Hinshelwood. La distribución de iones, debida íntegramente a procesos en fase gas, es producto de la competencia entre ionización directa por impacto electrónico, que depende de la temperatura electrónica y química ión-molécula. A 0.8 Pa aparecen en concentraciones comparables los iones H_3^+ , N_2H^+ y NH_4^+ , producidos por protonación de las moléculas precursoras, y H_2^+ y NH_3^+ , provenientes de ionización directa. A 8 Pa, las colisiones de H_3^+ , NH_3^+ y N_2H^+ con NH_3 son responsables de la gran prevalencia final de NH_4^+ .

Se ha realizado además una revisión general de los procesos químicos más importantes en plasmas fríos generados en descargas luminiscentes, tanto en fase gas como en las superficies en contacto con el plasma, incluyendo ejemplos ilustrativos de los distintos procesos, así como las técnicas de caracterización más importantes.

Dinámica y cinética de reacciones químicas. Procesos inducidos por láser

Se ha continuado el estudio de la dinámica de las reacciones de intercambio de proton (o deuterón) $D^+ + H_2$ y $H^+ + D_2$, poniendo especial énfasis en la simulación del conjunto de medidas de secciones eficaces y coeficientes cinéticos acumulados desde los ochenta para estos sistemas. Los resultados de esta exhaustiva comparación se presentarán en un futuro próximo. Utilizando métodos mecanocuánticos (QM) y trayectorias quasiclásicas (QCT) se han calculado coeficientes cinéticos para las variantes isotópicas de la reacción $H+H_2$ más diferentes en masa; en concreto para los sistemas $Mu+H_2$ y $He\mu+H_2$, donde Mu es muonio y $He\mu$ es un átomo de He en el que uno de los electrones se ha sustituido por un muón negativo. Los resultados se han comparado con las recientes medidas experimentales y cálculos de Fleming et al. (Science 331, 448, 20211). El método QCT reproduce razonablemente bien las observaciones si se pesan las trayectorias con una función gaussiana que favorezca aquella más próxima a la acción vibracional cuántica. El análisis de los resultados muestra que la gran energía de punto cero del producto MuH es el factor clave en gran efecto isotópico encontrado. Estos trabajos se han llevado a cabo dentro del marco de nuestra "Unidad Asociada de Química Física molecular", que incluye a grupos de la Universidad Complutense y del Instituto de Química Física Rocasolano. En el contexto de esta colaboración se han estudiado también procesos inducidos por láser. La generación de armónicos altos a partir de plasmas metálicos se estudió usando pulsos láser de 1 kHz. Se investigó la fotodisociación de agregados de pirrol-amoniaco utilizando la técnica de proyección del mapa de velocidades (velocity map imaging). Los resultados indicaron que proceso transcurre mediante una ruptura directa del enlace NH. También se realizó un estudio combinado experimental ("slice imaging") y teórico (paquetes de ondas en superficies múltiples) de la fotodisociación a 304 nm del CH_3I . El análisis de los resultados mostró que concurrían canales adiabáticos y no adiabáticos en la disociación.

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

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

El principal objetivo de esta línea de investigación es el estudio de los flujos de fluidos en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una tierra de nadie con acusado déficit de datos experimentales, de modelos teóricos suficientemente rigurosos, y de métodos de cálculo eficientes. Desde el punto de vista experimental, los chorros de líquidos subenfriados resultan ser un medio ideal para estudiar la solidificación homogénea, libre de los efectos de las paredes de recipientes y de impurezas. Por su parte, los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es viable el estudio del mecanismo fundamental de la transferencia de energía, las colisiones moleculares inelásticas, cuya formulación aparece en el núcleo de la ecuación integro-diferencial de Boltzmann generalizada.

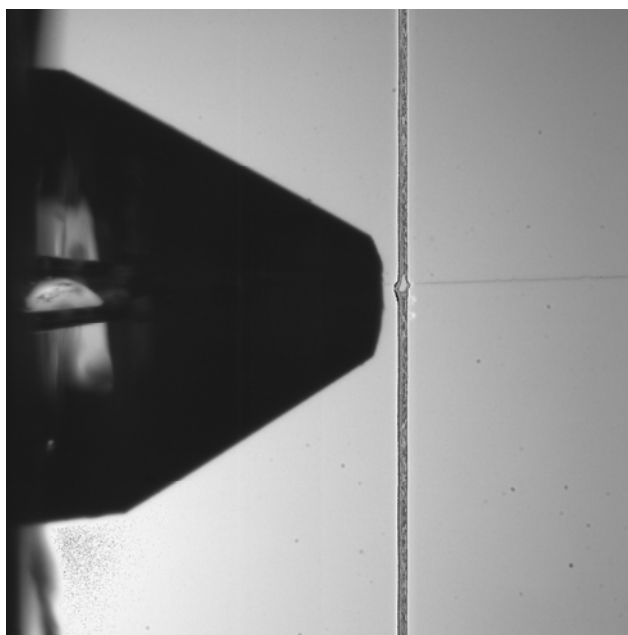
El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular dispone de dos instalaciones de diagnóstico de chorros, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos dieciocho años. Una (A) esta dedicada al estudio de colisiones cohesivas y chorros de líquidos, y la otra (B), a colisiones inelásticas. Sobre estas instalaciones hemos realizado a lo largo de 2011 algunas mejoras para adaptarlas a los experimentos que se han ido realizando. Así, se ha adquirido y montado en la instalación (A) un nuevo sistema de micro-actuadores motorizados que permite mover la tobera en las tres direcciones del espacio simultáneamente, con una resolución mejor que 100 nm, siguiendo trayectorias con una inclinación arbitraria. Esto ha sido de gran ayuda para el estudio espectroscópico de microfilamentos de líquidos subenfriados producidos con toberas capilares de vidrio enfriadas mediante un criostato de He líquido, que raramente son colineales con la tobera. Por su parte, en la instalación (B) se ha adquirido un nuevo grupo de vacío, específico para poder bombear oxígeno puro con una presión de trabajo unas 10 veces mayor (~2 bar), con lo que se espera alcanzar temperaturas rotacionales entre 4 y 10 K, así como observar la formación de dímeros y pequeños agregados de O₂. También se ha adquirido e instalado un nuevo sistema evaporador-mezclador para producir de forma controlada chorros gaseosos de mezclas de H₂O diluida al 2% en He o H₂ para medir sus colisiones, de gran interés astrofísico, y objeto de los proyectos de investigación en curso.

Por otra parte, se ha construido un conversor catalítico orto-para hidrógeno, mejorando un diseño original del Max-Planck-Institut für Strömungsforschung de Göttingen (Alemania). El nuevo conversor permite trabajar en flujo continuo con caudales hasta 5,4 g/hora y una fracción de orto-H₂ residual menor 0,4%. Esta gran pureza es un factor crítico en los experimentos de condensación ya que pequeñas cantidades de impurezas afectan notablemente la velocidad de nucleación. Incorpora además un segundo circuito no catalizado, utilizado como trampa criogénica para la preparación de mezclas. Se debe destacar que gran parte de las piezas, de gran precisión, han sido fabricadas en el Taller Mecánico del CFMAC, sin cuyo soporte no habría sido posible. El laboratorio dispone ahora de dos conversores, lo que ha permitido realizar los experimentos de mezclas de para-H₂ y orto-D₂ que se describen a continuación.

En la instalación (A) se han generado, en colaboración con la Universidad de Frankfurt (Alemania), microchorros líquidos (filamentos) de mezclas de para-H₂ y orto-D₂, al 2%, 20% y 50%. En vacío, estos filamentos, de 2 a 5 micras de diámetro, se enfrían por evaporación superficial, obteniéndose líquido altamente subenfriado por debajo del punto de fusión, hasta que se rompen en microgotas o solidifican. Sobre esos filamentos, monitorizados mediante imágenes de sombra por iluminación láser, se han realizado series de espectros Raman a distintas distancias axiales, lo que ha permitido medir la cristalización con una resolución temporal de ~10 ns. Así, se ha comprobado que pequeñas cantidades de impureza de orto-D₂ retrasan notablemente la velocidad de cristalización de para-H₂, un efecto de naturaleza cuántica no observado anteriormente.

En la instalación (B) se han realizado medidas de series de espectros Raman y Rayleigh de chorros supersónicos de H₂O pura desde toberas de 350 micras con temperaturas de estancamiento T₀=398 K y presiones desde p₀=40 mbar hasta 400 mbar, con el fin de estudiar las colisiones inelásticas H₂O:H₂O. De estas medidas ha resultado evidente que hay condensación para p₀>40 mbar, lo que perturba la evolución térmica e impide el análisis cuantitativo de la cinética colisional. Finalmente, se han realizado medidas en mezclas de H₂O al 5% en He, libres de condensación y en las que se alcanzan las temperaturas rotacionales de 36 K, las más bajas hasta la fecha. Con estos experimentos se espera poder cuantificar las colisiones H₂O:He. En este orden de cosas, se dispone de valores preliminares de tasas de transferencia por colisiones inelásticas, calculados por el grupo teórico de Dinámica e Interacciones del Instituto de Física Fundamental del CSIC, con el que se trabaja en estrecha colaboración.

En el capítulo metodológico se ha constatado la insuficiencia de los modelos habituales (basados en la aproximación isentrópica de un gas perfecto) para la caracterización precisa de la fluidodinámica de los chorros supersónicos. En consecuencia, se ha desarrollado una teoría fluidodinámica “ex novo” en base a los rigurosos principios físicos de conservación de masa, momento y energía, tratando el gas en expansión como un gas real, sin idealización alguna.



Filamento de 5 micras de diámetro de hidrógeno líquido a una temperatura de 15 K, cruzado por el láser de excitación a 100 micras de la tobera

Este desarrollo permite enlazar de forma rigurosa la mecánica del continuo con la mecánica cuántica, y describir el medio a escala molecular de forma más adecuada que a través de la intratable ecuación de Boltzmann generalizada. Esta teoría revela dos regímenes dominantes en los chorros, según sea “fácil” o “difícil” la transferencia de energía por colisiones inelásticas. Las ecuaciones fluidodinámicas resultantes permiten interpretar de forma natural la progresiva rotura de equilibrio térmico a lo largo del chorro, y cuantificar sus variables en términos colisionales a través del novedoso concepto de capacidad calorífica gas-dinámica, del cual la capacidad calorífica convencional es, tan solo, un caso particular válido únicamente para estados de equilibrio entre grados de libertad. La teoría desarrollada muestra también sin ambigüedad que los chorros supersónicos no son isentrópicos, aunque esta aproximación pueda ser útil en ciertas condiciones, que ahora quedan claramente delimitadas.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

El grueso del trabajo realizado durante el año 2011 en la línea de Espectroscopía Láser se ha llevado a cabo utilizando la técnica de Espectroscopía Raman Estimulada en sus diferentes configuraciones, estudiando diversas especies de interés en distintos campos. La primera de estas especies es el $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$, un isotópologo del acetileno que se ha estudiado en el marco de una colaboración ya bien consolidada con la Universidad de Bolonia y cuyo objetivo principal es la modelización precisa de los niveles de energía rovibracionales en toda la familia de isotópologos “comunes” (mono- o di-sustituídos con átomos de ^{13}C y D) del acetileno. En 2011 se han obtenido espectros Raman estimulados a temperatura ambiente de las bandas ν_1 , ν_2 , $\nu_2+\nu_4-\nu_4$, $\nu_2+\nu_5-\nu_5$, $\nu_2+2\nu_4-2\nu_4$, $\nu_2+2\nu_5-2\nu_5$, $\nu_2+\nu_4+\nu_5-\nu_4-\nu_5$ de esta molécula. Adicionalmente, y utilizando la técnica de doble resonancia Raman-Raman, se ha registrado también el espectro Raman de la banda caliente $2\nu_2-\nu_2$ a 160 K en condiciones de no-equilibrio rotacional a diferentes presiones. Además de información sobre los niveles de energía de esta molécula, el análisis de estos últimos espectros ha dado como fruto la observación de la regla de propensión $\Delta J=2$ para relajación colisional de especies quasi-centrosimétricas. Esta regla de propensión era conocida desde hace ya varias décadas para moléculas diatómicas pero nunca hasta la fecha había sido observada en una molécula poliatómica, por lo que su observación ha sido suficientemente relevante como para dar lugar a una publicación independiente como *rapid communication* en el Journal of Chemical Physics. Los resultados del análisis de las demás bandas también se han concluido con éxito y han sido publicados por separado.

La segunda de las especies estudiadas ha sido el $^{12}\text{CF}_4$, una molécula que recientemente ha despertado interés en estudios atmosféricos por su gran Potencial de Calentamiento Global (GWP), unas 6000 veces superior al del CO_2 , y su vida media de 50000 años en condiciones atmosféricas. Hemos obtenido espectros Raman de alta resolución a temperatura ambiente de las bandas ν_1 , $2\nu_1-\nu_1$, ν_2 , $2\nu_2$, $\nu_1+\nu_4-\nu_4$ y $3\nu_2-\nu_2$, y a 150 K nuevamente de $2\nu_1-\nu_1$ y de la extensa banda ν_2 . El análisis de estos espectros está siendo realizado en la Universidad de Borgoña por nuestro colaborador V. Boudon.

También se ha concluido y publicado un trabajo sobre la banda ν_2 de la molécula de Etano sustituido con ^{13}C ($^{12}\text{CH}_3\text{-}^{13}\text{CH}_3$) cuyo análisis se ha llevado a cabo en colaboración con el Profesor N. Moazzen Ahmadi de la Universidad de Calgary, y otro sobre la molécula de N_2 , para la que se hemos medido de forma muy precisa los ensanchamientos por autocoliciones a diferentes temperaturas.

En el Laboratorio de espectroscopía IR por diferencia de frecuencias ópticas, se ha desarrollado el método de medida precisa de frecuencias empleando una cavidad de transferencia y un láser de Ar^+ anclado a una transición del I_2 como referencia absoluta. La conclusión de este sistema está pendiente de la adquisición de un ondámetro comercial con una exactitud de 10 MHz. Se han llevado a cabo determinaciones preliminares de las prestaciones del nuevo diseño del espectrómetro, obteniendo una relación S/R en transmisión mejor que 1:2000. La exactitud en la escala de frecuencias en esta fase preliminar es del orden de $2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ tomando como referencia las medidas más precisas disponibles para el multiplete P(7) de la banda ν_3 del $^{12}\text{CH}_4$ realizadas por espectroscopía de saturación referenciada a un peine óptico de frecuencias.

En este laboratorio también se ha comenzado la puesta a punto de un dispositivo experimental encaminado a realizar espectroscopía Raman estimulada con láseres continuos en el interior de un nuevo tipo de fibras ópticas, *Hollow core photonic crystal fiber* (HCPCF). El mecanismo de guiado en este tipo de fibras (efecto de *band-gap* fotónico) hace posible diseñarlas con un núcleo hueco, susceptible de ser llenado con el gas de interés. El alto grado de confinamiento de la luz y la mayor longitud de interacción en este medio, nos ha llevado a concebir una nueva configuración experimental para realizar espectroscopía Raman de alta resolución sin láseres pulsados. Finalmente, se han observado las primeras señales Raman, con una resolución espectral mejor que 0.006 cm^{-1} y notable relación señal/ruido, en la banda ν_1 del CO_2 a 100 kPa.

FISICA MOLECULAR TEÓRICA

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular

Se ha continuado el estudio del control del alineamiento y la orientación de un sistema de moléculas diatómicas dipolares en una red óptica, sometidas a una combinación de campo eléctrico estático y un tren de pulsos láser intenso no resonante. La interacción dipolar de largo alcance introduce propiedades macroscópicas radicalmente nuevas en un gas cuántico y el campo está en plena expansión a nivel teórico y experimental. El control de la orientación de los dipolos permite controlar estas propiedades.

Una aplicación muy importante de estos sistemas es la Computación Cuántica. Hemos demostrado que la inclusión de pulsos láser no resonantes permite un control muy detallado del entrelazamiento entre moléculas dipolares en una red óptica.

En moléculas aisladas, se han estudiado los estados cíclicos para potenciales HCP (Half-Cycle Pulse). Estos potenciales intrínsecamente asimétricos permiten directamente la orientación de moléculas dipolares y sus estados cíclicos pueden ser creados y controlados de forma adiabática mediante una evolución adecuada del campo de control.

El control del grado de libertad de torsión en moléculas no rígidas es fundamental en áreas emergentes como la electrónica molecular y la nanotecnología. Basándonos en cálculos rigurosos de los niveles de energía rotación-torsión-Stark de moléculas no rígidas de tipo bifenil, hemos demostrado que, en contra de la creencia previa, los estados instantáneos de estas moléculas en interacción con un campo láser intenso están muy deslocalizados en la coordenada torsional, incluso para los estados de menor energía. Así, hemos demostrado que el control del cambio en la planaridad de esta molécula es esencialmente imposible para temperaturas mayores que unos pocos Kelvin.

Hemos continuado estudiado el estudio de la transferencia de energía en *light-harvesting complexes* (LHC) relacionados con la fotosíntesis y la importancia de la coherencia cuántica y aspectos no markovianos en el flujo de energía. Se ha utilizado un modelo excitónico y se ha calculado el rendimiento de la transferencia de energía así como su dinámica temporal para el complejo Fenna-Matthews-Olson. Hemos empleado el modelo para interpretar espectros de eco en dos dimensiones para este complejo. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo del Dr. Tobias Kramer en la Universidad de Regensburg.

Gases Cuánticos Ultrafríos

Hemos estudiado la generación de momento en un sistema de átomos inicialmente en reposo en una red óptica, modulando la red mediante un potencial periódico en el espacio y en el tiempo y de promedio cero. La generación de una corriente asintótica a tiempo infinito requiere la ruptura simultánea de la simetría espacial y temporal. Nuestro trabajo ha demostrado que, incluso en presencia de simetría de inversión temporal, se puede conseguir una

corriente promedio neta, en una escala temporal controlable comparable a la duración de un experimento real. El modelo que proponemos es altamente controlable y robusto. Hemos estudiado el efecto de la interacción entre partículas y demostrado que podemos generar y controlar corriente mantenida para este sistema mediante una modulación pulsada del parámetro de interacción.

Se ha continuado el estudio del uso de técnicas de conteo de átomos para distinguir fases fuertemente correlacionadas en átomos ultrafríos, tanto para bosones como para fermiones. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo del Prof. M. Lewenstein del Instituto de Ciencias Fotónicas de Barcelona.

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido.
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Micro- y nano-dureza.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.

- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección.
- Dispersión dinámica de luz laser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de PROPIEDADES FÍSICAS Y NANOESTRUCTURA DE POLÍMEROS

INFLUENCIA DE ADITIVOS EN LA NANOESTRUCTURA DE PVC REFORZADO CON BENTONITA

La nanoestructura de policloruro de vinilideno (PVC) reforzado con un 5% de bentonita ha sido investigada mediante difracción de rayos-X a ángulos altos y correlacionada con las propiedades mecánicas determinadas mediante experimentos de tensión uniaxial. Los resultados sugieren que el tipo de aditivo que se incluye en el nanocompuesto (un aditivo ignífugo o un pigmento dispersante) determina la morfología, nanoestructura y propiedades mecánicas del sistema. Se ha observado que el aditivo ignífugo favorece la intercalación de moléculas poliméricas entre las láminas de nanoarcilla y reduce la rugosidad de la película de nanocompuesto. En este caso, las láminas de bentonita se encuentran orientadas con sus planos paralelos a la superficie de las películas y esta orientación se mantiene durante el proceso de deformación uniaxial. Para este material, el módulo de Young y la tensión de fluencia aumentan respecto al PVC de control, mientras que la resistencia a la fractura disminuye sólo ligeramente. Por otra parte, el pigmento dispersante favorece la exfoliación de la bentonita. Las propiedades mecánicas del nanocompuesto con arcilla exfoliada no muestran una mejora respecto a la matriz, en particular, la resistencia a la fractura es mucho menor. Para este caso se sugiere que durante el proceso de deformación, la tensión se concentra en las láminas de arcilla y da lugar a una pérdida de adhesión entre la matriz y el refuerzo.

PROCESOS DE RECRISTALIZACIÓN EN PET: RELAJACIÓN MOLECULAR Y EVOLUCIÓN ESTRUCTURAL

Se ha empleado técnicas de espectroscopía dinamo-mecánica (DMA) e indentación para estudiar los cambios inducidos en las regiones amorfas de politereftalato de etileno (PET) como consecuencia de procesos de recristalización. Dichos procesos se desarrollan a partir de la aplicación de tratamientos térmicos a 115 °C y 125 °C en muestras previamente cristalizadas a 100 °C. Mediante estas técnicas se ha podido observar un aumento en la rigidez de las regiones amorfas confinadas por los cristales. Medidas de microdureza a temperatura ambiente sugieren que la dureza de las regiones amorfas aumenta cuando el material es sometido a un tratamiento de recristalización. El análisis de los espectros de DMA a una temperatura dada en un intervalo de frecuencias de 10^{-3} - 60 Hz indican la aparición de dos contribuciones que podrían ser análogas a las encontradas mediante espectroscopía dieléctrica en este mismo sistema. La contribución a mayor frecuencia podría atribuirse a relajaciones segmentales en regiones amorfas con menor grado de confinamiento. El modo asociado a una relajación más lenta estaría asociado a regiones amorfas con una dinámica conformacional fuertemente restringida por los cristales. Se ha observado que el proceso de recristalización produce un aumento de la amplitud del proceso de bajas frecuencias. Se ha empleado un modelo de relajación para estimar el tamaño de las regiones estáticas de reajuste cooperativo y se ha encontrado que este tamaño es mayor para las regiones asociadas al proceso de bajas frecuencias. Además, el mismo modelo sugiere que el tamaño de las regiones de reajuste aumenta con la recristalización.

DUREZA

Se ha realizado una actualización del capítulo “Hardness”, anteriormente publicado en la “Encyclopedia of Polymer Science and Technology”, en el año 2003. El artículo incluye una parte técnica correspondiente a los principios básicos de las medidas de dureza así como una descripción de los métodos que se emplean comúnmente en la determinación de la dureza, con especial énfasis en el empleo de la instrumentación asistida de nueva generación. El artículo contiene, además, una recopilación de los últimos avances en la aplicación de técnicas de indentación al estudio de materiales poliméricos y ofrece una revisión sintética de las correlaciones entre los mecanismos de deformación local y las entidades nanoestructurales básicas en materiales poliméricos.

Desde el punto de vista experimental se ha obtenido, mediante “spin-coating”, una serie de películas delgadas de polímeros amorfos con distintos espesores hasta unos pocos nanómetros. Se intenta desarrollar un método para la determinación precisa del espesor a partir de medidas de nanodureza, y poder correlacionar estos valores con las propiedades viscoelásticas de los materiales.

ESTRUCTURA Y DINÁMICA DE MATERIA CONDENSADA BLANDA Y POLIMÉRICA NANOESTRUCTURADA EN TRES DIMENSIONES

Polímeros semicristalinos. Dentro de nuestra línea de investigación encaminada a dilucidar la interrelación volumétrica (3D) entre la nanoestructura intrínseca de un polímero semicristalino y la dinámica segmental de la fase amorfa hemos demostrado, por primera vez, que la combinación de experimentos de espectroscopía dieléctrica con medidas de eco de espín neutrónico (Neutron Spin Echo, NSE) realizadas en un polímero deuterado modelo como es el poli(tereftalato de etileno)(PET) revela que la dinámica de polímeros semicristalinos se produce en un escenario homogéneo similar al que se considera válido para describir la dinámica de los polímeros amorfos. En consecuencia, la cooperatividad intermolecular de polímeros amorfos y semicristalinos es esencialmente similar. La reducida movilidad segmental del polímero semicristalino se limita a regiones, diferenciadas probablemente en el interface amorfo-cristal. El ensanchamiento de la relajación dieléctrica segmental observado en polímeros semicristalinos puede atribuirse al efecto de promediar experimentalmente una relajación homogénea sobre un entorno no homogéneo.

En un contexto similar, los efectos de la cristalización inducida por estiramiento mecánico sobre la dinámica segmental del caucho natural vulcanizado han sido estudiados mediante la combinación de espectroscopia dieléctrica y dispersión de rayos-X a ángulos altos. Hemos demostrado que la dinámica segmental está claramente afectada por la deformación uniaxial. Hemos puesto en evidencia que para niveles bajos de deformación no se produce cristalización pero sí un aumento significativo del esfuerzo dieléctrico. Este efecto es acompañado por un incremento de la fragilidad dinámica debido a la reducción de volumen libre inducido por la deformación que produce un aumento de la cooperatividad segmental. Mayores deformaciones inducen la aparición de cristales contrarrestando el incremento dieléctrico puesto que segmentos de la fase amorfa se van incluyendo progresivamente en la fase cristalina. Nuestros resultados apoyan un modelo morfológico para el caucho natural en el cual durante cristalización inducida por deformación sólo las cadenas más cortas se incorporan a los cristales mientras que una cantidad significativa de cadenas más largas se mantiene en la fase amorfa por efecto de los entrecruzamientos.

Dinámica en copolímeros di-bloque. La dinámica de un copolímeros de di-bloque en la estructura de fases separadas laminar y en el estado mixto ha sido estudiado por espectroscopía dieléctrica. Al elegir un sistema en el que las temperaturas de transición vítrea de los dos polímeros constituyentes no son muy diferentes hemos sido capaces de investigar las diferencias entre confinamiento fuerte y débil impuesto por las cadenas más rígidas. Nuestros resultados indican que en condiciones de fuerte confinamiento la dinámica segmental del componente más blando experimenta una desaceleración debido a la interacción con las cadenas más rígidas. Esto ocurre tanto en la fase separada como en la mezclada. Para el caso de fases separadas no observamos diferencias en la dinámica del bloque más blando al transitar del régimen de fuerte confinamiento a otro más débil. Sin embargo, para el sistema mezclada en régimen de confinamiento débil, es decir, a temperaturas mayores que la T_g del bloque polimérico más rígido, se observa una desaceleración de la dinámica del polímero más blando tendiendo a alcanzar aquella correspondiente al bloque más rígido.

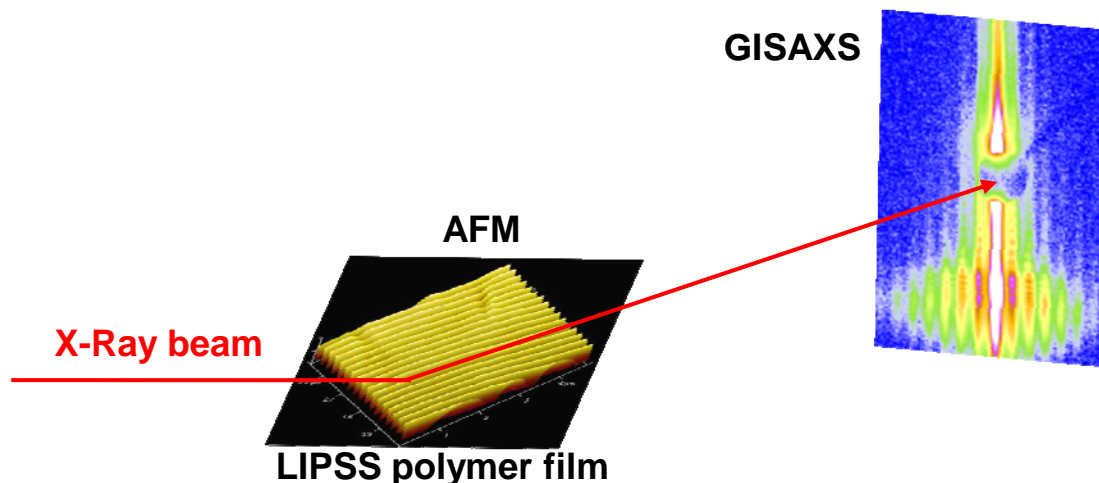
Autoensamblado en copolímeros dibloque. En este tema, y como continuación de los trabajos iniciados en años anteriores, se han realizado estudios sobre el impacto que tienen la nanoestructuración sobre la dinámica de copolímeros en bloque, tanto por medidas de espectroscopia dieléctrica como por medidas de espectroscopía de correlación de rayos X. Por otro lado, y en colaboración con el grupo del Profesor Enrique Vallés de la Universidad Nacional de Sur en Argentina, se está trabajando en el estudio del diagrama de fases de copolímeros di-bloque formados por poli(estireno) y poli(epsilon caprolactona) mediante dispersión de rayos X a ángulos bajos (SAXS) y altos (WAXS). Para composiciones ricas en poliestireno se observa una cierta inhibición de la cristalización de la policaprolactona debido al confinamiento resultante por la segregación de fases y al impedimento impuesto por los dominios rígidos de poliestireno. Para el resto de las composiciones y debido a la alta cristalizabilidad de la policaprolactona se observa una segregación de fases parcial.

Auto-ensamblaje en líquidos: alcoholes primarios. La transformación de líquidos sub-enfriados en cristales rotacionalmente desordenados es un ejemplo bien conocido de transiciones de fase controladas por la entropía que, junto con las transiciones de fase más conocidas, están presentes en una gran variedad de situaciones cotidianas y naturales. Como continuación de estudios previos llevados a cabo en SOFTMATPOL, hemos estudiado el diagrama de fases múltiple del etanol deuterado mediante una novedosa técnica que permite obtener información simultánea tanto estructural como dinámica. En concreto, se ha investigado la transformación de fase que le ocurre al etanol al pasar de líquido sub-enfriado a cristal plástico (fase rotadora) mediante un dispositivo experimental desarrollado por nosotros que combina simultáneamente espectroscopia dieléctrica con técnicas de difracción de neutrones. Hemos demostrado que, previo a la aparición de la fase de cristal plástico característica del etanol (cúbica centrada en el

cuerpo (BCC), tiene lugar la formación de una fase precursora mediante un proceso de separación de tipo líquido-líquido. Una vez que esta fase precursora está formada, se desarrolla la nucleación y el crecimiento de la fase de cristal plástico. Nuestros resultados pueden ser relevantes para comprender mejor la conocida red de enlaces de puentes de hidrógeno del agua que es responsable de la mayor parte de sus propiedades específicas.

NANOFABRICACIÓN DE ESTRUCTURAS POLIMÉRICAS

Nanorejillas poliméricas. Hemos empezado a explotar las posibilidades de los rayos láser con el fin de nanoestructurar superficies de las películas delgadas de polímeros. En colaboración con el grupo de la Dra. M. Castillejo (IQFR-CSIC) hemos podido nanofabricar estructuras superficiales periódicas inducidas por radiación láser (LIPSS) en una serie de películas de polímeros modelo preparadas por spin-coating incluyendo poli (tereftalato de etileno), poli (tereftalato de trimetileno), y poli (carbonato de bisfenol A) así como del polímero semicristalino poli(fluoruro de vinilideno). Hemos evaluado las posibilidades potenciales de las técnicas de dispersión de rayos X en incidencia rasante en la investigación de este tipo de sistemas. La irradiación de las películas de polímero con pulsos de láser de 6 ns a una longitud de onda de 266 nm produce estructuras características de nanorejillas (nanogratings) con largos espaciados similares a la longitud de onda del láser. Hemos propuesto que las nanoestructuras se forman por la desvitrificación de la superficie de la película polimérica a temperaturas superiores a la temperatura de transición vítrea característica del polímero. La información estructural obtenida por microscopía de fuerza atómica y de dispersión de rayos X en incidencia rasante a pequeños ángulos (GISAXS) se correlaciona de manera satisfactoria. La comparación de patrones GISAXS experimentales y simulados sugiere que las nanoestructuras pueden ser bien descritas considerando una red paracristalina unidimensional y que los parámetros de irradiación tienen una influencia sobre el orden de la red.



Esquema experimental para la caracterización estructural mediante dispersión de rayos X en incidencia rasante (GISAXS) con radiación de sincrotrón. El haz de rayos X incide con ángulo de reflexión total sobre una muestra polimérica nanoestructurada mediante LIPSS. La onda evanescente que se propaga a través de la muestra da lugar a efectos de difracción que son recogidos en una pantalla. Del análisis tanto de la imagen en el espacio real (AFM) como en el espacio recíproco (GISAXS) se puede caracterizar estructuralmente la muestra.

Litografía de nanoimpresión. Se ha comenzado con la preparación de nanoestructuras poliméricas mediante litografía por nanoimpresión, en colaboración con el grupo del Prof. Francesc Pérez-Murano del Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC, Barcelona). Por un lado se ha optimizado el proceso de fabricación de moldes, y en paralelo, se están llevando a cabo investigaciones sobre la física subyacente al proceso de nanoimpresión en materiales poliméricos cuya estructura está siendo analizada por microscopía a fuerza atómica y por difracción de rayos X.

MATERIALES POLIMÉRICOS FUNCIONALES A TRAVÉS DE LA MEZCLA CON NANOPARTÍCULAS

Preparación de materiales compuestos conductores con nanofibras de carbono, nanotubos de carbono y grafeno. Continuando nuestra colaboración con la empresa Grupo Antolín Ingeniería, S. A. se han desarrollado nanocompuestos de poliamida 6,6 (PA66) y nanofibras de carbono (CNFs) por un nuevo procedimiento consistente en la mezcla física, mediante un mezclador de vórtice, de la matriz del polímero, en forma de polvo preparado por

molido criogénico, y la cantidad correspondiente de CNFs. Los materiales presentan una buena conductividad eléctrica con umbrales de percolación más bajas que las correspondientes a los sistemas preparados por mezcla en fundido, que es el método comúnmente utilizado en la industria. Parte de este estudio ha sido patentado. Así mismo, se ha procedido a preparar compuestos basados en polifluoruro de vinilideno (PVDF) y diferentes compuestos carbonáceos como son nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT), las nanofibras de carbono suministradas por el Grupo Antolín Ingeniería S.A., grafeno expandido y grafito. En este caso el procedimiento de síntesis por el que se ha optado ha sido el de disolución. El objetivo es doble. Por una parte, determinar las propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas que presentan los diferentes compuestos y, por otra, realizar un estudio morfológico y estructural con el fin de establecer una relación entre ambos. Hasta el momento se han preparado compuestos en un amplio rango de concentraciones y se ha realizado el estudio eléctrico y térmico de los mismos. Se han observado interesantes diferencias entre los diferentes compuestos, principalmente en lo que a propiedades eléctricas se refiere.

Dentro del mismo contexto, en colaboración con el grupo del Prof. Z. Roslaniec, de la Universidad de Tecnología de Pomerania Occidental (Szczecin, Polonia) hemos sintetizado nanocompuestos de poli (tereftalato de trimetileno) (PTT) con nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT) funcionalizados mediante polimerización in situ. En comparación con la matriz de PTT, los nanocompuestos presentan mayor resistencia a la tracción y módulos de Young mayores para concentraciones bajas de MWCNT. Además, todos los nanocompuestos muestran una reducción de la fragilidad mecánica en comparación con el PPT. El umbral de percolación eléctrica se encuentra entre 0,3 y 0,4% de concentración de MWCNT.

Durante el año 2011 y en colaboración con el grupo del Prof. Z. Roslaniec, y del Dr. M.A. López-Manchado (ICTP-CSIC, Madrid), hemos iniciado la preparación de nanocomposites poliméricos con grafeno, del tipo grafito expandido, explorando diferentes matrices poliméricas. Los estudios iniciales indican logros de la conductividad eléctrica en concentraciones muy bajas de nanoaditivo. Estamos explorando las posibilidades de este tipo de nanocompuestos para obtener materiales conductores y transparentes.

Nanocompuestos basados en polímeros termoplásticos reversiblemente entrecruzados con arcilla. Continuando la línea de investigación iniciada hace algunos años, se han preparado nanocompuestos de arcilla con polímeros termoplásticos reversiblemente entrecruzados mediante extrusión reactiva: polipropileno isotáctico, iPP, polietileno, PE, y polibuteno-1 isotáctico, iPB-1 en un solo paso. Se han introducido algunas modificaciones en el método original que mejoran determinados aspectos del producto final. La arcilla puede usarse directamente, sin ninguna modificación química previa. Un aspecto muy interesante de este nuevo método, es que algunas cadenas del polímero se encuentran ancladas o injertadas (“grafted”) en las laminillas de arcilla, tendiendo a separarlas, y consiguiéndose así, para ciertas composiciones, una exfoliación total de la arcilla. Mediante este método se ha abordado también la preparación de nanocompuestos de mezclas binarias y ternarias de los polímeros anteriormente citados, normalmente considerados como incompatibles, con resultados son muy prometedores.

Propiedades dieléctricas de nanocompuestos basados en polímeros termoplásticos reversiblemente entrecruzados. Aprovechando la experiencia conseguida en este campo, hemos extendido nuestras investigaciones a algunos otros polímeros de interés creciente y ampliamente utilizados: poli (etilen tereftalato) PET, poli (etilen naftalen dicarboxilato) PEN, polimetilmetacrilato PMMA, y poli (fluoruro de vinilideno) PVDF. Además, nos interesa en particular aplicar el procedimiento para la obtención de nanocompuestos en un solo paso a la preparación de nanocompuestos de los polímeros anteriormente citados con arcilla, grafito y otros aditivos. Deseamos hacer un énfasis especial en el estudio de las propiedades dieléctricas de los materiales resultantes.

Nanocompuestos polímero/polímero metalo-orgánico. Se ha realizado un estudio en profundidad de las propiedades avanzadas de compuestos tipo polímero/polímero metaloorgánico. En particular, [Fe(II) (4-octadecyl-1,2,4-triazol)3(ClO4)2] en poliestireno. Los resultados confirman que, en presencia del poliestireno, se mantiene la transición estructural asociada a un cambio en la susceptibilidad magnética del polímero metalo-orgánico. Esta transición esta asociada a la conversión de estructuras laminares en estructuras hexagonales del polímero metalo-orgánico. El trabajo se ha realizado en colaboración con los doctores Daniel López y Rebeca Hernández del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC) y con la Doctora Ana Roig, del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC).

MICROSCOPIA DE FUERZA ATÓMICA(AFM)

Durante el año 2011 se ha implementado la instalación AFM con un sistema de medidas de fuerzas que permite no solo la visualización de estructuras nanoscópicas si no también la evaluación de las propiedades mecánicas de las mismas. Las nuevas prestaciones incluyen la mediad de módulo elástico, fuerzas de adhesión y de deformación así como la posibilidad de realizar experimentos de nanoindentación.

BIOSAXS

Caracterización de coloides de interés biológico y lipoplexos. Se ha continuado con la investigación sobre la estructuración de liposomas mixtos compuestos por un lípido catiónico y un zwitteriónico en presencia de ADN. Mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo se ha determinado el efecto de la composición lipídica en la estructura de estos lipoplexos y se ha comparado con el diagrama de fases teórico obteniéndose un acuerdo muy satisfactorio. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo del Prof. E. Aicart del Departamento de Química Física I de la Universidad Complutense de Madrid.

Estudio de nuevos fármacos en el proceso de ensamblado de microtubulos. Mediante técnicas de dispersión de rayos X y de neutrones es posible extraer información sobre la conformación de sistemas de interés biológico, como, por ejemplo, proteínas en disolución. En colaboración con el grupo del Dr. Fernando Diaz del Centro de Investigaciones Biológicas, se están llevando a cabo, mediante la técnica de dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) estudios sobre la influencia de nuevos fármacos antitumorales basados en taxoles, en el ensamblado de la tubulina. El objetivo es comprender los mecanismos, a nivel atómico y molecular, del ensamblado de microtubulos en presencia de los mencionados fármacos.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES

SIMULACIÓN DE FENÓMENOS FÍSICOS EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Dinámica molecular de polímeros en el fundido. El efecto de la arquitectura molecular en las propiedades físicas de las poliolefinas es crucial, modulándolas y dando lugar a una variabilidad práctica que no está presente en otras familias de polímeros. Se han diseñado simulaciones Monte Carlo (MC) de las dimensiones moleculares y de la dinámica molecular (MD) de cadenas de polímeros lineales y con ramificaciones cortas en el estado fundido, con el fin de esclarecer el efecto de la arquitectura molecular en los procesos de difusión y las propiedades viscoelásticas. Esta estrategia ha permitido obtener las características del estado de enmarañamientos mediante el mapeo de las simulaciones en el modelo de tubos y reptación de de Gennes y Doi-Edwards. Los resultados obtenidos ilustran la dependencia de las dimensiones de cadena, características de enmarañamiento y tiempos de relajación con la arquitectura molecular en consonancia con los resultados experimentales obtenidos por diferentes grupos de investigación. Además, estos resultados están en perfecta consonancia con la respuesta viscoelástica lineal en el estado fundido de modelos moleculares homogéneos, poniendo de manifiesto un efecto de la ramificación de cadena corta que hasta el momento no había sido detectado.

Potenciales de grano-grueso para el estudio de la cristalización de polímeros. La formación de núcleos poliméricos es el resultado del plegamiento de la cadena en segmentos perpendiculares a la superficie lamelar. En general, los experimentos no pueden trazar la evolución del movimiento individual de las cadenas poliméricas en la escala de tiempo en la que suceden los eventos característicos de la cristalización. De este modo, las simulaciones por ordenador representan una buena alternativa para elucidar los mecanismos de cristalización de polímeros. Sin embargo, su estudio mediante simulaciones atómicas detalladas es una tarea difícil, ya que se necesitan enormes cantidades de recursos computacionales. Una manera de construir modelos con menor esfuerzo computacional es promediar los movimientos rápidos (y no importantes en la escala de tiempo de interés) mediante la eliminación de grados de libertad atómico. De este modo, los potenciales atómicos “duros” se reemplazan por potenciales de fuerza media. Estos potenciales se derivan de simulaciones atómicas de sistemas pequeños usando el método iterativo de la inversa de Boltzmann. Se han realizado estudios de los procesos de cristalización del PVA y PE con diferente grado de ramificación. En general, los modelos CG reproducen el comportamiento de las simulaciones atómicas y, cuando existe, las simulaciones están en concordancia con los datos experimentales, por ejemplo, cristalinidad, densidad y tamaño molecular en función del grado de ramificación.

Simulación de la cristalización isotérmica de polietileno en presencia de nanotubos. La adición de nanocargas a matrices poliméricas y el estudio del efecto que causan en las propiedades son temas de gran interés en el campo de la física de macromoléculas sintéticas, dadas las expectativas generadas en cuanto a la transferencia de sus excelentes propiedades. Desde el punto de vista de la simulación por ordenador, se ha estudiado el efecto de la presencia de nanotubos de carbono en el proceso de cristalización isotérmica a 300 K de cadenas aisladas de polietileno y copolímeros etileno/1-hexeno de composición variable mediante simulaciones de dinámica molecular. En estos modelos, la presencia del nanotubo juega un papel destacado en cuanto a la cristalización puesto que, ofrece una superficie de contacto donde la cadena puede cristalizar y el proceso de nucleación se ve favorecido. Sin embargo, la presencia de ramificaciones limitó la formación de los cristales aún con la presencia del nanotubo. En general, estos modelos nanoestructurados presentaron un mayor orden y cristalinidad, lo cual se puede reflejar en una mejora en cuanto a las propiedades mecánicas de estos materiales.

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

En consonancia con los estudios realizados mediante simulación por ordenador, se ha llevado a cabo un estudio exhaustivo de las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas, sus mezclas, así como de sistemas compuestos de poliolefinas con nanotubos de carbono, tanto en el estado fundido como en el estado sólido. Estos estudios se han llevado a cabo en el marco de colaboraciones con distintos grupos de investigación, tanto industriales (Dow Chemicals Ibérica) como académicos. El estudio de las propiedades en el fundido de los modelos homogéneos ha permitido distinguir y separar entre efectos de características moleculares que normalmente se confunden: las colas de alto peso molecular y la ramificación de cadena larga, muy importantes además en fenómenos asociados con la procesabilidad. En cuanto a los sistemas multicomponentes, se hay que destacar que se producen importantes efectos emergentes, ligados a interacciones específicas entre los componentes, y que provocan propiedades interesantes desde el punto de vista aplicado. Asimismo, se ha podido estudiar el efecto que causa la arquitectura molecular de las matrices poliméricas en las propiedades físicas en presencia de nanotubos de carbono. Los resultados obtenidos pueden tener importantes implicaciones a nivel básico y aplicado. En cuanto a las propiedades en el estado sólido, el estudio de los sistemas mediante distintas técnicas experimentales, como la calorimetría diferencial de barrido, rayos X de ángulo alto y bajo y análisis dinamo-mecánico, ha permitido ahondar sobre el conocimiento de la compleja estructura de fases, que puede ser modulada en función de su arquitectura molecular y estructura de fases, y de las que dependerán las propiedades finales. Por otro lado, desde un punto de vista más básico, se ha realizado un exhaustivo estudio mediante microscopía electrónica de transmisión del proceso de cristalización desde disolución diluida de modelos moleculares ramificados. Se ha podido comprobar el profundo efecto de la ramificación, no solamente en el hábito cristalino, sino también en el tamaño de los cristales, que además se corresponde perfectamente con las simulaciones por ordenador.

SIMULACION DE SISTEMAS MACROMOLECULARES BIOLÓGICOS

Simulación de aminoácidos dipeptídicos en disolución acuosa. Los dipeptidos son moléculas importantes debido a que son modelos adecuados como “ladrillos” fundamentales de las proteínas. El estudio de las conformaciones predominantes de todos los posibles dipeptidos es relevante para entender los elementos de estructura secundaria en proteínas. Hemos combinado simulaciones de dinámica molecular “umbrella sampling” (USMD) con los estimadores de MBAR (Multiple Benner Acceptance Ratio) para calcular las conformaciones intrínsecas de 19 aminoácidos, exceptuando la prolina. Nuestros resultados confirman que las conformaciones extendidas del dipeptido (P_{II} and β) están más pobladas que las helicoidales α , esto es opuesto a la tendencia general encontrada en la literatura de simulación. Esta diferencia se ha atribuido a la combinación de USMD/MBAR y el potencial de interacción OPLS-AA. Además, nuestros resultados están en mejor concordancia con las propensidades recientemente publicadas obtenidas mediante espectroscopia IR y Raman sobre los mismo dipeptidos. Se ha discutido la influencia de los enlaces de H entre el agua y los dipeptidos sobre las conformaciones de estos últimos. Se ha encontrado que las conformaciones extendidas tienen una mayor probabilidad de formar puentes de H que las helicoidales. En el caso de la alanina, se han realizado cálculos de alto nivel Car-Parrinello para estudiar estas interacciones no enlazantes entre el disolvente y el dipeptido. Estos cálculos están en buena concordancia con los resultados de las simulaciones USMD/MBAR y con los experimentos. Hay que destacar que el trabajo que supuso el inicio de esta actividad científica (V. Cruz, J. Ramos and J. Martínez-Salazar, “*Water-mediated conformations of the alanine dipeptide as revealed by distributed umbrella sampling simulations, Quantum Mechanics based-calculations and experimental data*”, The Journal of Physical Chemistry B **115**, 4880-4886, **2011**) tuvo un gran impacto y los resultados fueron destacados en numerosos medios de comunicación.

Receptores ERBB. La sobreexpresión aberrante de algunos miembros de la familia de receptores del factor de crecimiento epitelial (ERBB) está asociada a un pronóstico pobre en varios tipos de cáncer, en particular, el de mama. ERBB2 y ERBB3 son dos miembros de esta familia que son utilizados como marcadores tumorales correlacionados con una mayor agresividad del tumor. Estas proteínas transmembrana están asociadas a procesos de crecimiento y proliferación celular y son consideradas unas dianas importantes en terapias para tratamiento del cáncer. En nuestro grupo de investigación se están realizando en la actualidad simulaciones de dinámica molecular a nivel atómico sobre el dominio extracelular de las ERBBs, en paralelo con estudios experimentales con el objetivo de conocer las características estructurales y dinámicas de dichos receptores de cara a diseñar nuevas alternativas terapéuticas contra el cáncer.

Mecanismo de acción de AS-48. Se han identificado pequeños péptidos con estructura secundaria de α -hélice como agentes antimicrobianos en varios organismos. El mecanismo por el cual dicho péptido soluble se convierte en una proteína ligada la membrana bacteriana es esencial para entender la toxicidad de las toxinas anti-bacterianas. AS-48 es una bacteriocina cíclica de 70 residuos. Es producida por un *Enterococcus faecalis* y es única por su estructura cíclica y por su amplio espectro antimicrobiano contra bacterias Gram-positivas y Gram-negativas y sugiere que AS-48 puede ser un buen candidato a preservativo natural alimentario. El objetivo primario de AS-48 es la membrana celular bacteriana, donde aparentemente forma poros dando lugar a la permeabilidad de la membrana bacteriana.

Sin embargo, desde el punto de vista experimental no se ha podido avanzar más y queda por resolver el mecanismo detallado por el cual se produce dicha adhesión a la membrana bacteriana y como se produce la permeación de dicha membrana. En nuestro grupo estamos llevando a cabo simulaciones de dinámica molecular de sistemas compuestos por varios protómeros de AS-48 y la bicapa lipídica como representación de la membrana bacteriana, con el objetivo de aportar nueva información sobre el mecanismo bactericida de AS-48.

BIOFÍSICA: ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL E HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades de macromoléculas biológicas como las proteínas y otros complejos macromoleculares biológicos permite obtener información sobre cuál es su función en su contexto biológico. Con este fin, se han estudiado proteínas relacionadas con cascadas de señalización celular eucariota mediante las técnicas de microscopía electrónica tridimensional y técnicas hidrodinámicas en disolución diluida como la dispersión dinámica de luz. Estos estudios se han realizado en colaboración con otros grupos, tanto nacionales (Departamento de Cristalografía y Biología Estructural en el IQFR/CSIC) como internacionales (Sino Biological Ltd., Beijing), concretamente en el estudio de proteínas de membrana involucradas en los canales iónicos de ciertas plantas, así como en proteínas involucradas en procesos de señalización celular. Gracias a ellos hemos podido aportar información sobre las dimensiones globales de estos complejos macromoleculares e identificar como se organizan en el espacio. Las macromoléculas sometidas a estudio están implicadas en procesos tan importantes para la célula como son los mecanismos de detección de señales externas, adaptación al medio y transformación celular.

DESARROLLO DE CAMPOS DE FUERZA PARA LÍQUIDOS IÓNICOS

Líquidos iónicos (ILs) son sales formadas por un gran número de combinaciones de diferentes cationes y aniones. De esta manera, los ILs se pueden fabricar a medida para obtener propiedades físico-químicas de interés industrial. En este caso, hemos estudiado el líquido iónico $[EMIM]^+[B(CN)_4]^-$ debido a sus atractivas propiedades termodinámicas tales como muy baja viscosidad y alta estabilidad térmica y química. Se han desarrollado tres campos de fuerza diferentes para este ILs ajustando el potencial electrostático de las conformaciones estables del par iónico usando el procedimiento EA-RESP. Los resultados de densidad están en muy buen acuerdo con los experimentales en un amplio intervalo de temperatura. El refinamiento de los parámetros LJ para el anión en el FF-3 permite una mejora de las propiedades de transporte simuladas frente a los valores experimentales. En el futuro, la transferibilidad del campo de fuerzas FF-3 será estudiada para cadenas alquílicas más largas en el catión. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con Prof. Ioannis Economou (The Petroleum Institute, United Arab Emirates), Dr. Nuno Garrido (Universidade do Porto), Dr. Andreas Fröba y Mr. Thomas Köller (University of Erlangen-Nuremberg).

MICROSCOPIA ELECTRÓNICA DE TRANSMISIÓN en BIOPHYM

La instalación de microscopía electrónica de transmisión del BIOPHYM ha sido ampliamente utilizada para visualizar diferentes tipos de materiales estudiados por diversos grupos del IQFR, ICTP e IEM del CSIC. En estos trabajos se han estudiado las características estructurales de nanopartículas, materiales poliméricos o materiales compuestos de ambos. En la mayoría de los casos las muestras se estudiaron bien como partículas independientes dispuestas sobre las rejillas de microscopía o como secciones ultrafinas. A continuación se enumeran algunos de los sistemas estudiados:

- Nanopartículas de platino, plata, oro, óxido metálico y “quantum dots”.
- Nanopartículas de oro recubiertas de sílice.
- Magnetita recubierta de oro, plata, sílice.
- Secciones ultrafinas de matrices poliméricas reforzadas con cargas como, por ejemplo, nanopartículas de carbono, nanoarcillas, etc.
- Nanocompuestos reforzados con nanocargas.
- Micelas y vesículas poliméricas.
- Nanocomposites de titanio.

En la mayoría de los casos se pretendía conocer la nanoestructura de las partículas o la dispersión y organización de las nanocargas en matrices poliméricas.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical Physical-Chemistry applied to Astrophysics.

RESEARCH SUBLINES:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Quantum Cosmology.
- Loop Quantum Gravity.
- Black hole physics.
- Computational methods in gravitational physics.
- 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.
- Inelastic non-reactive collisions at low temperatures.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY:

QUANTUM GRAVITY& QUANTUM COSMOLOGY

During the year 2011 we have carried to completion the work that we had been developing in the last years on the study of black hole entropy in loop quantum gravity (LQG). Specifically we have been able to finish the study of the asymptotic behavior of the entropy as a function of the horizon area. The most important open problem in this regard was to determine if the intriguing structure observed for low areas was also present in the asymptotic regime. To accomplish this goal, during 2010 we developed a number of statistical methods that led to an efficient approximation procedure for the statistical entropy that clearly explained why the low area substructure had to disappear at large scales. The result that we have just described can be understood, from a completely different perspective, if we rely on the formalism of statistical mechanics and, in particular, on some aspects related to its mathematical foundations. In this context it is of basic importance to understand the mathematical properties of the entropy as a function of the energy (the relevant variable in standard statistical mechanics). It is very important, for example, to determine under which conditions the entropy is a sufficiently smooth function of the energy and its convexity properties. The first point is relevant because thermodynamical properties (such as the temperature of a given system) are defined as derivatives of the entropy, whereas the second is central to the understanding of the stability of physical systems. The classical theorems on these issues prove that in the so called thermodynamic limit the entropy satisfies reasonable smoothness and convexity properties.

During the last year we have devoted a considerable effort to understand the thermodynamic limit for black holes by using the combinatorial methods that we have developed in the preceding years. As in the case of interest for us it is possible to effectively build both the microcanonical and the canonical (area) ensembles, we have been able to study the behavior of black holes in the thermodynamic limit (not to be confused with the large area limit). The most important conclusion of our work is that, in this limit, the entropy is indeed a smooth and concave function of the area and it also satisfies the Bekenstein-Hawking law. It is important to highlight, nonetheless, the fact that

subdominant corrections (proportional to the logarithm of the area) are different for the statistical (counting) entropy and the true thermodynamical entropy. This fact is relevant not only within the context of LQG but also for other approaches to quantum gravity such as string theories.

The methods of LQG have also been employed to analyze the quantum realm in cosmological systems, in the field of specialization that is nowadays known as loop quantum cosmology (LQC). In particular, during 2011 we have implemented and compared the so-called improved dynamics prescriptions that exist for LQC in the literature, studying homogeneous and isotropic spacetimes containing a massless scalar field. We have checked that all these prescriptions lead to the same qualitative results for semiclassical states in such cosmological spacetimes, and that the physical behavior is in fact similar even for states which are not so semiclassical or in regimes where the quantum effects start to be not totally negligible, although there exist discrepancies. What is more important, not all of these prescriptions have the same properties from the viewpoint of numerical computations. In particular, a prescription introduced by us seems especially simple to implement and reduces considerably the time of computation. We have optimized the codes of our numerical library for simulations in LQC in order to take full advantage of the features of this specific prescription.

During this year we have also successfully applied loop techniques to inhomogeneous cosmologies of the Gowdy type including a massless scalar field, reaching for the first time a complete and consistent quantization in the framework of LQC for a model with local degrees of freedom in the matter content and in the geometry. We have developed a proposal for a hybrid quantization of this model, and implemented it to completion, proving the consistency of the approach. The aim of this work has been manifold: a) to obtain an exact quantum description of inhomogeneous cosmologies with matter fields that includes effects of the loop quantum geometry, b) to determine the space of physical states and a complete set of physical observables, c) to prove that the quantum dynamics is well posed, d) to demonstrate that the cosmological singularities are resolved in this framework, and e) to show that one recovers the standard Fock quantization for the inhomogeneities in appropriate regimes for physical states. Moreover, restricting the analysis to the vacuum case, we have also discussed the effect of the inhomogeneities on the Big Bounce that replaces the Big Bang singularity, using the effective theory associated with our exact quantum model. The analytical study has confirmed the qualitative robustness of the bounce. Numerical simulations have shown that this robustness is also quantitative. Besides, this numerical analysis has demonstrated that the amplitudes of the inhomogeneities do not change statistically in the bouncing process, except when they are small, case in which they seem to be enlarged by a kind of enhancing mechanism. This mechanism might explain the relatively large amplitude of primordial fluctuations if it is confirmed in more realistic cosmological models.

In field like systems like this, which possess an infinite number of degrees of freedom, a severe problem are the ambiguities found in the quantization process, which affect the final outcome in the quantum theory. In the case of a Fock quantization, where one can reach a concept of particle for the field (at least to a certain extent), an important part of these ambiguities are those arising in the choice of a quantum representation. This problem is encountered in standard quantum field theory on curved backgrounds, but also in the case of the quantization of the inhomogeneities within the hybrid scheme put forward by us in the framework of LQC. In stationary settings, symmetry or energy criteria are known to select a unique Fock quantization. Quite remarkably, we have been able to prove recently that, even in non-stationary settings, one can pick up a unique Fock quantization by introducing the criteria of a) invariance of the vacuum under the symmetries of the field equations, and b) unitarity in the dynamical evolution (with respect to an emergent time related to area or volume elements). This uniqueness provides a considerable robustness to the results of the quantization and its physical predictions. Strictly speaking, the uniqueness theorems reached so far apply to the case of scalar fields on any compact spatial topology and in any spatial dimension equal or smaller than three. Applications for an unambiguous quantization of perturbations in cosmology are almost direct.

Another research line that we have followed has been the analysis of Hawking radiation in a Schwarzschild black hole as perceived by different observers. The method is based on the introduction of an effective temperature function that varies with time. First we introduce a non-stationary vacuum state which mimics the process of switching on Hawking radiation in a stationary spacetime. Then, we analyse this vacuum state from the perspective of static observers at different radial positions, observers undergoing a free-fall trajectory from infinity, and observers standing at rest at a radial distance and then released to fall freely towards the horizon. We find that generic freely-falling observers do not perceive vacuum when crossing the horizon, but an effective temperature a few times larger than the one that they perceived when started to free-fall. We explain this phenomenon as due to a diverging Doppler effect at horizon crossing. From a different perspective, we use the trans-Planckian problem of Hawking radiation as a guiding principle in searching for a compelling scenario for the evaporation of black holes or black-hole-like objects. We argue that there exist only three possible scenarios, depending on whether the classical notion of long-lived horizon is preserved by high-energy physics and on whether the dark and compact astrophysical objects that we observe have long-lived horizons in the first place. Along the way, we find that a) a theory with high-energy superluminal signalling and a long-lived trapping horizon would be extremely unstable in astrophysical

terms and that b) stellar pulsations of objects hovering right outside but extremely close to their gravitational radius can result in a mechanism for Hawking-like emission.

ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE

During 2011, we have investigated two different aspects of the electronic properties of the carbon material, which have to do with the electronic confinement in graphene bilayers and the dynamical generation of a gap by many-body effects in monolayer graphene.

We have studied the possibility of localizing electrons in graphene by means of synthetic gauge fields, created by the mismatch in the lattice registry of strained or twisted bilayers. It is known that the most favorable regular structure of graphene bilayers corresponds to the so-called Bernal or AB stacking, in which the carbon atoms in a sublattice of one of the layers fall onto the atoms in the complementary sublattice of the other layer. When the lattices are distorted, either by strain, shear or twisting, the perfect registry is lost, and one observes the appearance of typical Moiré patterns where regions of AB stacking alternate with others realizing AA stacking, in which the carbon atoms in one of the layers fall onto homologous atoms in the other layer. We have shown that the alternation between the two types of stacking produces the same effect as having a non-Abelian SU(2) gauge potential, with the ability of confining electrons in those regions of the bilayer where the periodic effective field strength becomes maximum.

By applying uniaxial shear to one of the layers, for instance, we can create a quasi-one-dimensional Moiré pattern with a perfect sequence of AA-AB-BA stacking along one of the directions of the bilayer. In this case, the electronic density can be confined into 1D channels corresponding to the regions with AA stacking, or AB-BA stacking, depending on the longitudinal momentum of the electronic states. The band structure becomes strongly reminiscent of that found in thick carbon nanotubes in a real perpendicular magnetic field, where there is also a periodic modulation of the flux around the section of the tube. The lowest-energy subband becomes extremely flat for large period of the stack modulation, corresponding to states localized in the regions of AB and BA stacking. Beyond a certain value of the longitudinal momentum, the electronic states start to disperse along branches linear in energy. This signals the development of propagating modes along the one-dimensional channels with AA stacking, in close analogy with the behavior of the edge states in the quantum Hall effect of a 2D electron liquid in areal magnetic field.

We have also applied our gauge field approach to understand the electronic properties of twisted bilayers, where the relative rotation of one layer with respect to the other induces a superlattice with alternating regions of AA, AB and BA stacking. We have seen that the electron system develops an extremely flat lowest-energy subband for certain magic values of the rotation angle, showing that this feature is a direct consequence of the presence of an effective non-Abelian SU(2) gauge field across the bilayer. The lack of dispersion is actually the signature of localized low-energy states that are bound in this case around the regions of AA stacking, giving rise to a triangular array of quantum dots. We have found that this pattern of confinement is consistent with the periodicity of the maxima in the effective field strength, and that the first instance at which the lowest subband becomes flat corresponds to the point where the unit cell of the superlattice is threaded precisely by the quantum of gauge flux.

The present approach supports in general the possibility of using the graphene bilayers to realize non-Abelian Aharonov-Bohm interferometry, by which the amplitude of electrons injected into one of the layers may oscillate and even become completely transferred to the other layer along their propagation. Furthermore, our study may also open a new route to address the problem of localization of electronic states, which are not effectively constrained by scalar potential barriers in graphene, but may be otherwise confined and manipulated in electronic devices made of graphene bilayers.

On the other hand, we have continued the investigation of the dynamical generation of a gap in graphene, analyzing in particular the impact that the electron self-energy corrections may have on the chiral symmetry breaking in the interacting theory of Dirac fermions. Our starting point has been the ladder approximation for the electron-hole vertex appearing in the response function for dynamical gap generation, which we have improved by including systematically the self-energy corrections to electron and hole states in the ladder series.

In this framework, we have been able to account for the effect of the Fermi velocity renormalization on the critical coupling for dynamical gap generation. In this respect, the growth of the Fermi velocity at low energies has been already observed in experiments carried out by the group of A. K. Geim with graphene at very low doping levels. Our results have shown actually that the effect of renormalization of the Fermi velocity induces a significant reduction in the strength of the dynamical symmetry breaking. We have found that the dynamical gap generation may take place above a critical value in the graphene fine structure constant $\alpha_c \approx 4.9$, in the case of static RPA

screening of the interaction potential in the ladder series, and above a value $\alpha_c \approx 1.75$ in the more sensible instance of dynamical screening of the interaction.

The main conclusion of our work is that the value $\alpha_c \approx 1.75$, resulting from the most accurate treatment of the many-body corrections, still remains below the nominal value of the graphene fine structure constant in vacuum. This means that an isolated free-standing layer of the material should be in the phase with dynamical gap generation, in agreement with most part of less precise theoretical studies on the subject, but apparently at odds with present experimental measures in suspended graphene samples. A key observation is however that, if chiral symmetry breaking is to proceed in graphene according to our estimates, it should lead to a gap at least three orders of magnitude below the high-energy scale of the Dirac theory. This suggests then that the dynamical gap generation cannot be discarded in isolated free-standing graphene, though its experimental signature may be only found in suitable samples, for which the Fermi level can be tuned within an energy range below the milli-electron-Volt scale about the charge neutrality point.

EXACTLY SOLVABLE MODELS

The Richardson-Gaudin (RG) integrable pairing models emerged from the combination of the exact solution of the BCS Hamiltonian obtained by Richardson in the sixties and the integrable model of quantum magnetism found by Gaudin in the seventies. Formally, the RG models can be classified into two families, the rational family and the hyperbolic family. The rational family contains the BCS Hamiltonian as well as many other exactly solvable Hamiltonians studied in the last decade in the areas of nuclear structure, ultrasmall superconducting grains, quantum dots, trapped cold fermionic and bosonic gases, etc. In 2009 it has been shown that the $px+ipy$ pairing Hamiltonian describing the interaction between spinless fermions in 2D lattices, is exactly solvable and it pertains to hyperbolic family. This Hamiltonian, studied by Read in connection to the fractional quantum Hall effect, has a phase diagram with a topological phase transition (without order parameter). From the exact solution we studied the phase diagram of for one channel Hamiltonians (pairing interaction). The model displays a quantum phase transition of 3rd order compatible with the lack of an order parameter. The exact wave function of the RG models is a product of correlated pairs whose bound energies come from the solutions of the Richardson equations. The size of the condensed wave function, which experimentally accessible in ultracold polarized gases, displays a divergence at the critical point. Therefore, it can be used as an experimental signature. The structure of the Cooper pairs is more difficult to be revealed experimentally. However, its size has been associated with threshold in energy of the radio-frequency spectrum in trapped gases. The structure of p-wave pairs is different of the s-wave pairs. It shows an abrupt change between the weak pairing phase (extended pairs) and the strong pairing phase (bound pairs). We studied the extension of the $px+ipy$ model to a two channel model in which the interaction is mediated by a p-wave Feshbach resonance. The corresponding phase diagram also shows a 3rd order quantum phase transition that we characterized by means of the *quantum fidelity*. The analysis of this magnitude led us to conclude that the phase transition cannot be described by the Landau theory.

The second realization of the hyperbolic family consists on an exactly solvable Hamiltonian with non-degenerate single particle energies and a separable pairing interaction with two free parameters. One of the parameters is the strength of the pairing interaction and the other is an energy cutoff. We showed that these parameters can be conveniently chosen to reproduce the physical properties of the ground state of heavy nuclei described by the Gogny force. In particular, we showed that the hyperbolic model describes with great precision the wave function of the Gogny Hartree-Fock-Bogoliubov approximation. We also showed that the Gogny gaps display a behavior compatible with the square root in the form factors of the hyperbolic interaction. This new exactly solvable model opens the way for the construction of a self-consistent algorithm of Hartree-Fock plus exact pairing for the description of masses and low energy properties of heavy nuclei.

QUANTUM TRANSPORT

During 2010 we have focused our efforts in the study of the transmission phase through quantum dots in the Coulomb blockade regime. Quantum mechanics fundamentally differs from classical mechanics in that time evolutions are determined by complex probability amplitudes instead of real probabilities. The associated phase is a key element to understand mesoscopic transport experiments on Aharonov-Bohm (AB) conductance oscillations, weak localization, and conductance fluctuations. For a long time, the transmission amplitude phase through a quantum dot could not be measured directly. The pioneering experiments of Yacoby *et al.* opened a new field in mesoscopic physics at the end of the 90s when they embedded a quantum dot into one of the arms of an Aharonov-Bohm interferometer. However, these experiments have escaped a consistent and generic theoretical explanation. Specially surprising is the fact that a phase lapse of π always appears between resonances in the transmission phase for quantum dots with large number of electrons.

We have investigated transport through ballistic quantum dots in the Coulomb blockade regime. We have shown through theoretical arguments based on the shape of the wave functions of chaotic quantum system and numerical calculations, the emergence of long universal sequences of resonances and phase lapses in the short wavelength limit. Our results are in qualitative agreement with experiments on Aharonov-Bohm interferometry. Moreover, our results predict the disappearance of the observed universal regime in the presence of strong magnetic fields and in larger quantum dots in the diffusive regime.

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

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

More specifically, during the last months our work has been focused in two main issues: The first one concerns the triple-alpha process and its reaction rate at very low temperatures. The fact that at such low temperatures the energies involved are far below the lowest 0^+ resonance in ^8Be implies that a sequential description through that particular two-body resonance is not obvious. In fact we have found that a direct capture description of the process, without populating any intermediate two-body state, could increase the reaction rate by up to 7 orders of magnitude for a temperature of 10^7 GK. The second main topic refers to the description of 1+2 reactions by use of the recently derived two integral relations. We have found the method to be very successful to describe processes below the two-body breakup threshold, not only for elastic processes, but also for inelastic and transfer reactions. Application of the same method for energies above the breakup threshold is the next step. In this connection, very promising and preliminary results have recently been obtained.

STELLAR WEAK DECAY RATES FOR THE rp PROCESS

Weak decay rates under stellar density and temperature conditions holding at the rapid proton-capture process has been studied in neutron-deficient medium-mass waiting-point nuclei extending from Ni up to Sn. Neighboring isotopes to these waiting-point nuclei are also included in the analysis. The nuclear structure part of the problem is described within a deformed Skyrme Hartree-Fock + BCS + quasiparticle random-phase-approximation approach, which reproduces not only the β -decay half-lives but also the available Gamow-Teller strength distributions measured under terrestrial conditions. The various sensitivities of the decay rates to both density (ρ) and temperature (T) have been discussed.

There are several distinctions between terrestrial and stellar decay rates caused by the effects of high ρ and T . The main effect of T is directly related to the thermal population of excited states in the decaying nucleus, accompanied by the corresponding depopulation of the ground states. The weak decay rates of excited states can be significantly different from those of the ground state, and a case-by-case consideration is needed. Another new effect comes from the fact that atoms in these scenarios are completely ionized, and consequently, electrons are no longer bound to the nuclei but form plasma obeying a Fermi-Dirac distribution. This opens the possibility for continuum electron capture, in contrast to the orbital electron capture produced by bound electrons in an atom under terrestrial conditions. Thus, we have studied the decay of the ground and excited states in the parent nucleus by introducing a partition function and statistical weights, as well as the competition between β decays and continuum electron captures. We find a non-negligible contribution from the decay of excited states, which is larger for low-lying excited states. We also find that contributions from continuum electron captures are comparable to those from beta-decay for waiting-point nuclei at the rp -conditions. These contributions are usually neglected in present network calculations.

SHAPE TRANSITIONS IN NEUTRON-RICH ISOTOPES

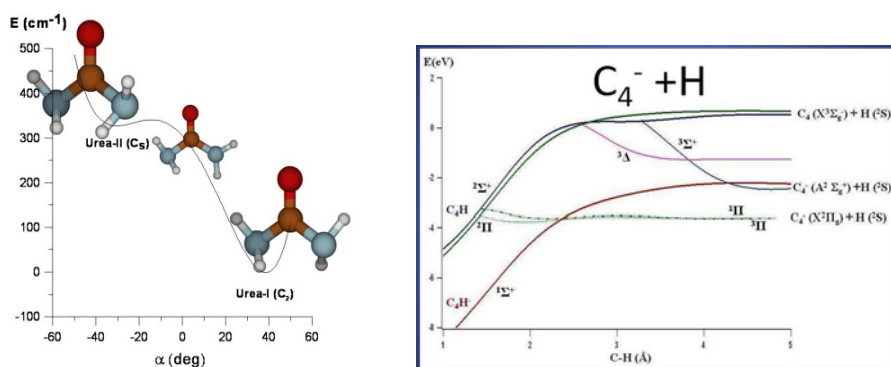
The study of the nuclear shape evolution as the number of nucleons changes is nowadays a highly topical issue in nuclear physics from both theoretical and experimental points of view. Especially interesting are those situations where the nuclear structure suffers drastic changes between neighbor nuclides. This is the case of the neutron-rich isotopes with masses around $A=100$. These structural variations lead often to sudden changes of particular nuclear properties that can be used as signatures of phase/shape transitions.

We have studied the bulk and spectroscopic properties of neutron-rich even-even and odd-A isotopes in this mass region within the selfconsistent Hartree-Fock-Bogoliubov approximation based on the finite range and density dependent Gogny energy density functional (EDF). In addition to the well known D1S parametrization of the Gogny-EDF, we also consider the most recent parametrization DIM. From this comparison we evaluate not only the robustness of our results, but we also explore the capability of DIM to account for the phenomenology of odd-A nuclei, not so well studied yet. The description of the odd-A nuclei is done in terms of the equal filling approximation, a prescription widely used in mean-field calculations to preserve the advantages of time-reversal invariance. We have analyzed various nuclear properties, such as two-neutron separation energies, charge radii, and the spin-parity of ground states in a search for signatures of shape transitions. In several isotopic chains we have found clear signatures of a sharp shape transition at N=60 in both charge radii and spin-parity of the ground states, which are robust, consistent to each other, and in agreement with experiment. In other isotopic chains the shape transition disappears, stabilizing one of the shapes or developing triaxial deformations. We point out that the combined analysis of these two observables could be used to predict unambiguously new regions where shape transitions might develop.

THEORETICAL PHYSICAL-CHEMISTRY APPLIED TO ASTROPHYSICS

During 2011, we have performed molecular studies within the three sub-lines of research carried out by our group: molecular spectroscopy of prebiotic non-rigid molecules of astrophysical interest; structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species of astrophysics and atmospheric importance and determination of cross sections in non reactive inelastic collisions at very low temperatures. In all these works, high-level ab initio calculations are used as a basic tool to determine potential energy surfaces and molecular structures. From these methods and with our ro-vibrational codes ENEDIM and FIT-SPEC we predicted many spectroscopic properties. Molecules and the problems addressed are relevant to the study of the gas phase chemistry of the interstellar and circumstellar media and planetary atmospheres. Research carried out within the scientific exploitation of new observatories Herschel and ALMA programs.

In recent years, we have been developing very detailed studies focused to the characterization of carbon-chains of astrophysical importance. Carbon-chains are relevant isolated species as well as important intermediates of formation processes of large molecules such as the PAHs and Fullerenes. We have studied with very precise methods small size chains that are relatively abundant in carbon rich sources. We initiated the sequence by pure chains type C_n with a reduced number of atoms (n) and likely to be detected with infrared techniques using the instruments of the new Herschel Space Observatory. Currently, we are studying neutral and charged chains type C_nX_m ($X = Si, S$ or H) and type $SiNH_n$. These species, which are difficult to be treated at the laboratory level for its low stability, have permanent dipole moment and are therefore detectable through radio astronomy. They are therefore relevant species with a view to the future project ALMA. We provided special attention to the anions due to the recent interest awoken in the astrophysical community, studying C_4H^- (detected by IEM astronomers) and anions type SiC_n and SiC_nH . We have identified isomeric structures, potential energy surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonicity effects. We provide possible isomerization processes and predict Renner-Teller and rovibronic effects.



For the ALMA project science exploitation, it is necessary to understand the millimeter and sub-millimeter spectra of non-rigid molecules containing the most abundant interstellar elements C, N, O and H. Many of these molecules are classified as prebiotic. They show very low energy vibrational levels that can be populated at very low temperatures. These levels correspond to the large amplitude vibrations that inter-transform minimum energy structures through feasible potential energy barriers. Given the astrophysical interest, we are studying with very precise initio method the torsional and bending modes of dimethyl-ether and methyl format. Recently, UREA has

been proposed as possible interstellar molecule, whereas the corresponding gas phase far infrared are not well explored. We carry out this work in collaboration with the University of Huelva and the University of Lille.

Finally, the collisional study of SO₂ with ortho-H₂ and para-H₂ has been completed at very low temperatures. Determination of the collisional parameters for abundant species in astrophysical sources and molecular hydrogen is essential to understand the observed intensities. These depend on the populations of the levels, which are the result of radiative and collisional excitations and de-excitations. We are studying sulphur oxides and carbon-chains. The parameters are obtained in molecular dynamics calculations using as input, Van der Waals potential energy surfaces. These are determined with very accurate ab initio calculations. The theoretical study of SO₂ has allowed to predict transitions and a new maser motivating new astrophysical observations that have demonstrated the accuracy of the theoretical predictions.

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

RESEARCH LINES:

- Experimental Nuclear Physics.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Computing simulations using R3BRoot for nuclear physics experiments.
- Systems devoid of long-range order.
- Advanced instrumentation.
- Surface Spectroscopies.
- Surface Plasmon Photonics and metamaterials.
- Biospectroscopy.
- Chemical-Physics of deposition and ablation processes.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of drip line nuclei.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- 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.
- Nuclear structure physical behaviour at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Surface-enhanced (SEVS) on metal nanostructures.
- Vibrational Spectroscopy applied to Cultural Heritage.
- SEVS applied to pollutant detection.
- Applications of SERS to biology: drug/biomolecule interaction.
- Plasmon resonances on metal nanostructures (Nanoantennae): Raman and Fluorescence.
- Metamaterials in the optical range.
- Infrared Laser induced ablation plasmas.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Beta decay studies at ISOL facilities, ISOLDE and REX-ISOLDE@CERN.

- Reaction studies at low energy at the 5MV accelerator CMAM@UAM.
- Reaction studies at relativistic energies, the R3B experiment at GSI.
- GEANT4 Monte Carlo simulation of experimental set-up and detectors.
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Mathematics and computing methods.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Numerical simulation.
- Computational methods.
- Neutron scattering.
- Calorimetric techniques.
- Absorption techniques.
- IR Spectroscopy (Normal, FTIR, and SEIR).
- Raman Spectroscopy (normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging and SERS).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of twodimensional correlation by H/D isotopic exchange.
- Optical Emission Spectroscopy (OES).
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Multivariate statistical analysis.
- Theoretical Physics (Classical Electrodynamics) and numerical calculations.
- Laser Induced Fluorescence (LIF).
- Laser Physical Deposition (LPD).

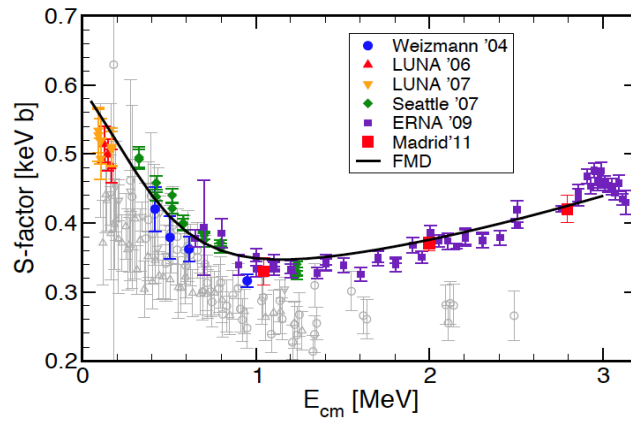
RESEARCH ACTIVITY:

CHARACTERIZATION OF NUCLEAR STATES RELEVANT IN STELLAR NUCLEAR-SYNTHESIS PROCESSES

Along the years we have developed techniques that allow us to go deeply into the decay modes of exotic nuclei, and especially to learn about the breakup of unbound states and determination of the reaction rate for reaction of astrophysical relevance. In previous years we informed about the study in full kinematics of the 3-alpha breakup of the levels of ^{12}C -populated in the β^+ -decay of ^{12}N and β^- -decay of ^{12}B . As the study of the breakup of the low energy levels of ^9Be is relevant to the $^4\text{He}(\alpha, \gamma)^9\text{Be}$ reaction rate. This reaction is an alternative to the triple-alpha fusion in neutron-rich stellar scenarios. Complementary to this work we have studied the reaction $^{10}\text{B}+^3\text{He}$ whose channels through states in ^{12}C and ^9B provide information on excited states not accessible to the beta decay thus a complete picture of the structure of these nuclei can be obtained. This work is based on experiments conducted at the Nuclear Physics line at the Tandetrón installed in the CMAM, UAM. We are still working in preparing the papers connected to the final results such as “*Observation of a decay from a state in ^{10}B at 11.48 MeV*”, PRC in acceptance process; “*Improved limit on direct α decay of the Hoyle state*”, PRL submitted and “*Properties of ^{12}C resonances above the triple-alpha threshold from studies in complete kinematics*”, in preparation.

The $^3\text{He}({}^4\text{He}, \gamma){}^7\text{Be}$ nuclear reaction plays an important role in determining both primordial ${}^7\text{Li}$ abundance and the high energy solar neutrino flux from the disintegration of ${}^8\text{B}$ coming from the ${}^7\text{Be}$ proton capture. Currently, this reaction is one of the remaining major sources of uncertainty among the nuclear inputs required to calculate the high energy solar neutrino flux. Experimental restrictions make impossible to measure the cross section of this reaction at the energy of interest (Gamow Peak 23 keV), thus, models use the extrapolation of the astrophysical factor ($S_{34}(E)$) at zero energy determined at higher energies.

In collaboration with University of York and The Weizmann Institute in Israel we have performed measurements at our beam line at the 5MV tandem accelerator CMAM (Univ. Autonoma de Madrid) in order to determine the cross section of the ${}^3\text{He}+{}^4\text{He} \rightarrow {}^7\text{Be}$ reaction as a function of energy. The technique used in the experiment is the activation method which consists on the detection of the delayed 478 keV ray from the first excited state in ${}^7\text{Li}$ after the ${}^7\text{Be}$ electron capture decay. From the obtained cross section data we determine the astrophysical factor for different center of mass energies. A paper is in preparation with the results obtained so far in this work. This experiment is the thesis work of our JAEpredoc student M. Carmona.



The figure shows a compilation of the existing data on S_{34} -factor along with our results (Madrid'11). 'Data points in colour' are taken from refs. [PRL **93**(2004)262503](Weizmann'04), [PRL**93** (2004)262503](LUNA06, 07), [Phys. Rev. **C76** (2007)055801] (Seattle'07), [PRL **102**(2009) 232502] (ERNA'09). The data points shown in grey come from Ref. [Rev. Mod. Phys. **83**(2011)195]) and at medium energies is also included data from Parker et al. [Phys. Rev. **131**(1963)2578], which do not agree with the Madrid'11 and ERNA'09. A normalized curve of the calculations made by T. Neff, PRL **106**(2011)042502 is overlaid on the data points.

The reaction $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$ plays a key role in nuclear astrophysics as it determines the carbon to oxygen ratio and strongly influences the nucleosynthesis of all heavier elements. The cross section of this reaction at helium-burning temperatures is of the order of 10^{-17} barn, which renders an experimental study unfeasible. The reaction is known to be dominated by a sum of resonance tails and direct captures to both the ground and excited states of ^{16}O . Of particular interest are the 2^+ and 1^- states located at 6917 and 7117 keV, respectively. Our group has proposed to use the $^{19}\text{F}(p,\alpha)^{16}\text{O}$ reaction to populate the states of interest in ^{16}O . A first run test was performed at CMAM on December of 2011. The experimental setup consisted of four dE-E telescopes, composed of two 60- μm DSSDs + 500- μm PADs placed downstream of the target, plus two 20- μm SSSDs + 300- μm DSSDs. A primary beam of protons was accelerated at energies in the range 800 to 1500 keV, and impinged upon an MgF_2 target. The outgoing particles were detected in coincidence using the four detectors. Our EXNUC Postdoc Ana D. Becerril will analyze the data from this run in collaboration with L. Buchmann from TRIUMF, Canada. Monte Carlo simulations will be performed and compared to experimental results. Based on our findings an optimized measurement will be proposed at CMAM later in 2012.

DIPOLE POLARIZABILITY STUDY OF LIGHT NUCLEI

One of the most important and unexpected discoveries of Nuclear Physics in recent years has been the existence of the neutron halo in some nuclei near or at the drip line. A halo state is basically a threshold effect resulting from the presence of bound states near the continuum. The combination of a small binding energy together with the short-range of nuclear forces allows the nucleon (or a cluster of nucleons) to go far away and to have a non-negligible probability at distances much greater than the normal nuclear radius ($= r_0 A^{1/3}$, $r_0 = 1.2$ fm).

The polarizability parameter is a fundamental property of a nucleus and it is a measure of its response to an external electric field. In the adiabatic limit (corresponding to high excitation energies), the deviation of the elastic scattering cross section with respect to the prediction of the Rutherford formula is determined by the strength of the dipole polarizability. Consequently, measuring the elastic cross section of a nucleus by a heavy target at sub-Coulomb energies provides a practical method for determining the polarizability parameter of this nucleus. To determine the polarizability in stable and standard nuclei and in the extreme case of halo nuclei we have performed experiments both at CMAM and in different radioactive beam facilities. In the following we describe the advances done during 2011.

The effect of dipole polarizability should be particularly large for nuclei with halo and should manifest as a reduction of the elastic cross section at large angles. So we have performed an experimental and theoretical study of the scattering of halo nuclei at energies near the Coulomb barrier. This project is carried out in collaboration with groups from the Universities of Seville and Huelva, with whom we have associated units. We have studied two neutron halo nuclei such as ^6He , see 2006 annual report, and in 2008 we measured ^{11}Li at TRIUMF (Canada) and we have studied the one neutron halo in ^{11}Be at REX-ISOLDE (Eur.Phys. J. A, 2009, PRL 2010 and PRC in preparation). The analysis of the Triumf data is almost finished and forms the PhD thesis of our student (grant CSIC-Costa Rica) Mario Cubero. The result shows that the elastic differential cross section obtained for ^{11}Li on lead

show an enormous reduction that could only be explained considering dipole polarizability effects and coupling to the continuum. These results have been presented at various conferences this year (FUSION11 Saint-Malo, France, Rutherford Centennial Conference – Manchester UK), and they are now being summarized in an article.

On November of 2011 our group performed an experiment at CMAM Madrid dedicated to measure the elastic scattering cross section of ^3He on a heavy target. The aim of this work is to extract the dipole polarizability of ^3He , and to compare it to previous measurements, which are in disagreement. A beam of ^3He was accelerated at the 5 MV Tandem at CMAM and impinged upon a ^{208}Pb target, covering the energy range between 9 and 15 MeV. The setup consisted of two Double-sided Silicon Strip Detectors (DSSD) placed at backward angles, plus one Si surface barrier detector placed at 60° . Analysis of the data from this measurement is currently being carried out by our postdoc A. Becerril.

BETA DECAY STUDY OF THE N=Z NUCLEUS ^{72}Kr

The beta decay of N=Z nucleus ^{72}Kr was measured at ISOLDE (CERN) with “Lucrecia”, a Total Absorption gamma Spectrometer (TAS) with the aim of determining the sign of the deformation from the Gamow-Teller strength distribution. The analysis of the data showed up the need for further information on the competence between conversion electrons and gamma emission of low energy transitions. This is why we performed complementary measurements in order to determine the conversion coefficients of low energy transitions in the daughter nucleus, ^{72}Br . Of special interest was to determine the half-life of the isomeric state at 101 keV in ^{72}Br and the multipolarity of the gamma transition connecting with the ground state as the spin of the latter has been debated and it is still not firmly established.

The analysis of the electron conversion data has been performed and the results are in progress to be published. The conversion coefficients of several low energy transitions in the beta decay of ^{72}Kr have been determined, allowing to extract valuable information on the spin-parity of several excited states in the daughter nucleus. In particular, the multipolarity of the transition connecting the isomeric state with the ground state has been determined as well as a new measurement of the half-life of the isomeric state through the study of the time evolution of the gamma emission of this deexcitation.

These results on the level scheme at low excitation energy of ^{72}Br allow us to face the analysis of the data taken with the TAS “Lucrecia” which is currently in progress. The experimental distribution of Gamow-Teller strength in our decay will be obtained from the beta feeding distribution to excited levels in ^{72}Br through the beta decay of ^{72}Kr . This complete study of the beta decay of N=Z nucleus ^{72}Kr is the main topic of the Ph. D. work of the student José A. Briz (PhD Fellowship-FPI).

TRANSFER REACTIONS ON EXOTIC NEUTRON-RICH BEAMS AT REX-ISOLDE

Single-nucleon transfer reactions constitute an excellent tool to study single-particle properties of nuclear states. In particular they provide essential data to study the evolution of shell structure and of effective single-particle energies away from the line of beta stability. Dr. Riccardo Orlandi, member of our group since June 2010 (and since January 2011 on a CPAN Postgraduate contract), is involved in the study of single-nucleon transfer reactions at REX-ISOLDE. The experiments exploit the coupling of the T-REX Si array to the MINIBALL germanium detector array. In 2011 R. Orlandi and A. Jungclaus were actively involved in the setup and running of one such experiment: $^{72}\text{Zn}(t,p)^{74}\text{Zn}$, which took place in October 2011. R. Orlandi is currently carrying on the data analysis for the $^{78}\text{Zn}(d,p)^{79}\text{Zn}$ experiment which was performed at ISOLDE at the end of 2010. Preliminary results from these data have already been presented as oral contributions to three international conferences during 2011 (ARIS – Leuven, NCNP – Stockholm, Rutherford Centennial Conference – Manchester).

EVIDENCE FOR A SPIN-ALIGNED NEUTRON-PROTON PAIRED PHASE FROM THE LEVEL STRUCTURE OF ^{92}Pd

In an experiment performed at GANIL (Caen, France), the excitation scheme of the extremely neutron deficient nucleus ^{92}Pd has been studied for the first time within an international collaboration. The Pd nuclei were produced using a fusion-evaporation reaction and identified using the gamma spectrometer EXOGAM, the CsI array DIAMANT for charge particle detection and a neutron wall comprising 50 liquid scintillators. The study was aimed at investigating a long standing question that has received considerable attention in nuclear physics – whether a new type of pair correlations between neutrons and protons (“isoscalar pairing” where the proton and neutron spins are fully aligned) could appear in nuclei with equal numbers of neutrons and protons. In all atomic nuclei studied until now, the low-lying structures are generally characterized by pair correlations between like-nucleon pairs, i.e. pairs of neutrons and pairs of protons. Since these are identical particles they must, according to the Pauli Principle, have

oppositely aligned spins. This pairing gives rise to properties similar to superfluid helium and superconductivity resulting from paired electrons in condensed matter physics. In the structure that has been identified in the palladium isotope ^{92}Pd , the neutrons and protons couple into a system of spin-aligned pairs, leading to completely different properties compared with what is found in "normal" atomic nuclei. The interpretation of the experimental data has been provided with the aid of microscopic nuclear shell model calculations. These calculations suggest a completely different picture for the heavy self-conjugate nuclei to what has been proposed in earlier theoretical models of neutron-proton pairing. The results of this experiment have been published in 2011 in *Nature* (B. Cederwall et al.).

MAGNETIC MOMENT MEASUREMENTS WITH STABLE (UNILAC, GSI) AND EXOTIC, NEUTRON-RICH (REX-ISOLDE) ION BEAMS

Magnetic moments are a sensitive probe of single-particle properties in nuclei. They can be measured by observing the perturbation introduced by a magnetic field on the angular correlation of gamma rays emitted in the de-excitation of the nuclear state of interest. Magnetic moment measurements were of paramount importance in the development of nuclear structure, and they were and are still essential to test the predictive power of the nuclear shell model. In 2011 we published the results of state-of-the-art measurements of excited state magnetic moments in stable tin isotopes using the transient field technique (TF) in combination with Coulomb excitation in inverse kinematics (A. Jungclaus et al., PLB; J. Walker et al., PRC; J. Walker, PhD thesis, Universidad Autónoma de Madrid, May 2011). The g factors of the first excited 2^+ states in a series of Sn isotopes, determined with unprecedented precision, allowed to discriminate between a number of different modern shell model approaches and thus shed light on the development of collectivity in the semi-magic chain of Sn isotopes.

While the TF technique is well established in conjunction with stable ion beams the development of radioactive beams, while extending the domain of investigation to exotic nuclear realms very far from the line of stability, pose new experimental challenges. Our group accepted these challenges and intended to overcome certain inherent limitations thanks to the construction of a new, purpose built, state-of-the-art reaction chamber, which was developed and built at IEM-CSIC. The new chamber harbors the external coils and yoke to produce the 80 mT field required to magnetize the ferromagnetic Gd target layer and a liquid-nitrogen cooling circuit to keep its temperature well below the Curie temperature. In November 2011 A. Jungclaus, A. Illana, A. Perea, J. A. Briz and R. Orlandi, in collaboration with researchers from other European research institutes, run the first part of the experiment IS483 at REX-ISOLDE, CERN, aimed at measuring the magnetic moment of the first excited 2^+ state in ^{72}Zn . The obtained data are currently being analyzed by A. Illana in the frame of his PhD work and the experiment will be completed with the remaining shifts in 2012. This pioneering measurement should permit to test the best available large-scale shell model calculations which describe this region of the nuclear chart.

REFLECTION ASYMMETRY IN LIGHT-ACTINIDE NUCLEI USING THE GAMMA-RAY TRACKING ARRAY AGATA

Reflection asymmetry and octupole deformation are well established nuclear properties and have been observed in medium to heavy nuclei across the whole nuclear chart. On this topic, we participated in an experiment at the Laboratori Nazionali di Legnaro (Legnaro (PD), Italy) in March 2011 to characterize new structures observed in the octupole-deformed light-actinide nuclei ^{220}Ra and ^{222}Th . The main goal of the experiment was to measure the linear polarization of gamma transitions linking new, unpublished rotational bands to the ground-state band. This experiment made use of the AGATA demonstrator, an array of five triple cluster highly segmented germanium detectors, which offers unprecedented sensitivity, resolution and efficiency by exploiting its tracking capabilities. The gamma-ray interaction positions within the AGATA detectors can be used to reconstruct the scattering angles of the transitions of interest, and hence determine their linear polarization. In this context it is also worth mentioning that in 2011 the AGATA collaboration, the experimental nuclear physics group of the IEM is member of, reviewed all the achievements made in the AGATA project in recent years including all the necessary infrastructure to operate and support the spectrometer in an extensive (33 pages) article published in *Nuclear Instruments and Methods A*.

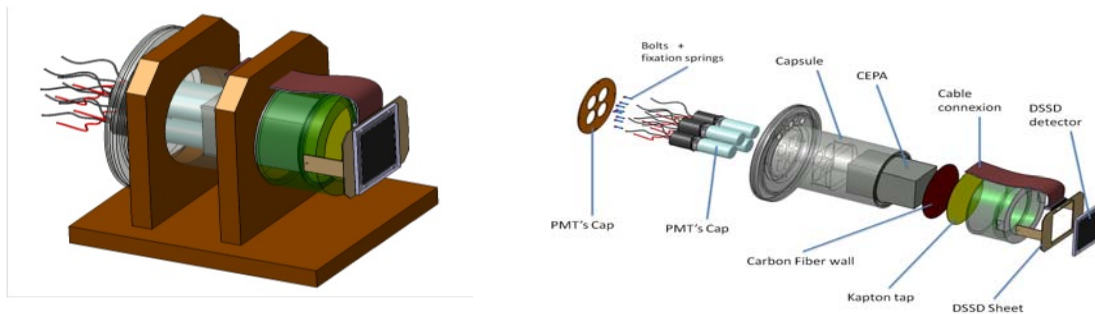
R+D FOR THE R3B EXPERIMENT AT THE FUTURE FAIR FACILITY

The experiment R^3B is part of the first phase of the FAIR facility. The experimental configuration of R^3B is designed for the detection in complete kinematics of the products emitted in reactions at relativistic energies. The CALorimeter for In-Flight gammaA detection (CALIFA) will be situated around the reaction target and should be able to reach the necessary angular and energy resolution to detect gamma cascades of 1 to 10 MeV with a strong Doppler broadening and Lorenz boost as well as to detect protons of up to 300 MeV energy.

Our R&D work concentrates on developments for the CALIFA gamma and proton spectrometer. We have within the collaboration concluded the design of the *Barrel* part of the CALIFA calorimeter and a Technical Design Report (TDR) was, in December 2011, handed in to the FAIR management for evaluation.

The Madrid group has in 2010-11 developed, in collaboration with the company Mesytec a *Temperature and Bias control* of the preamplifier stage in order to cope with the very sensitive LAPD light collection diodes. The preamp has been further adapted to handle the huge dynamic energy range to be covered using the *Time-Over-Threshold* method. The full system has been designed to fit with the specific crystal encapsulation and the boards modified so that the preamplifiers with the temp and bias stabilisation are directly fitted onto the crystals.

In the design of CALIFA's forward end cap an innovative solution using two scintillators crystals stacked together, one after the other, in a so called Phoswich configuration with a common readout is being considered, see the 2010 annual report. The experiments using this first LaBr₃-LaCl₃ Phoswich detector are now fully analysed and the result fits perfect with the GEANT4 simulations we have performed, a NIM article, "A high Resolution Phoswich:LaBr₃(Ce) coupled with LaCl₃(Ce)" is in preparation. Based on these results we have simulated, designed and constructed a CEPA demonstrator consisting 2x2 crystal cluster of 4 cm long LaBr₃(Ce) coupled with 6cm long LaCl₃(Ce) crystals in Phoswich configuration. This detector was delivered in December 2011, and is now being mounted in a specially designed support structure, see the figure. During 2012 a full characterization and evaluation of this Phoswich approach will be performed.



The CEPA(CALIFA Endcap Phoswich Assembly) detector mounted on a methacrylate table support for its characterization in the laboratory. On the right, a zoom of the pieces that constitutes CEPA. As seen the detector is mounted on a vacuum flange so it can be used together with our particle detectors.

Focusing on the end-cap, IEM group has been working on the overall design of the end cap to obtain a perfect adaption to the CALIFA barrel. This design is independent of the final choice of crystal material. This design is made so that the front-end cap, CEPA, can work as a stand-alone detector and on the same time be fully integrated into the Barrel. The design goal is a perfect adaption to the barrel, with minimum dead material and a minimum number of overall crystals (each crystal ad an electronic chain) as well as a minimum number of crystal types (for each type of crystal one will have to pay for the "mask/design" to the company). As the end cap is the lid of the barrel it has the shape of a circular disc. In its present design it is formed by 750 crystals grouped in 10 equal "packages" of 75 crystals separated into 5 alveoli of 15 crystals. Further, as the crystal size along the polar angle has to match with the effect of the Lorentz boost on the gamma rays emitted in flight, it is natural to divide the disc into ring segments. Every ring has a different polar direction depending on the energy resolution decided ($k=3.75\%$). The geometry of the crystals are rectangular pyramids with truncated bases with their edges dependent on the polar angular change (frustrum-shaped crystals), so that it is adapted to the energy uncertainty associated to the γ Lorentz transformation characteristic of relativistic velocities of the gamma radiation. The total dead volume (including wrapping) is 15 %.

BEAM DIAGNOSTICS STUDIES FOR HIE-ISOLDE

The Dr. Francesca Zocca, sponsored by the Consolider CPAN project, is working in beam diagnostics developments that are carried out on the framework of the R&D program for the HIE-ISOLDE superconducting (SC) upgrade of the REX-ISOLDE linear accelerator at CERN. In particular, a silicon monitor prototype has been developed and successfully tested to be located downstream the cryogenic SC modules, for beam energy and timing measurements aimed at the SC cavities phase tuning. The energy measurements performed at REX allowed for beam spectroscopy and ion identification with a resolution of 1.4 to 0.5 % rms in the REX energy range from 300 keV/u to 3 MeV/u. The time profile of the beam, characterized by a bunch period of 9.87 ns, has been measured with a resolution better than 200 ps rms. The achieved resolutions are suited for a fast phase tuning of the cavities, which has been demonstrated at REX while using both energy and time-of-flight measurements.

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANO-SCALES

Probably molecular hydrogen (H_2) is the most obvious candidate to replace the fossil fuels as an energy vector environmentally neutral. A safe and efficient H_2 storage presents, however, a series of unsolved technological challenges. One possible solution is the adsorption of H_2 at low temperatures in light nanostructured materials. However, practical limitations impose a minimum temperature of 77 K (air liquid temperature) and a maximum pressure around 50 atmospheres. These are very challenging thermodynamical conditions. Above 33 K molecular hydrogen is in a supercritical state, that is, it is a fluid than cannot be condensed. In other words, the thermodynamic state is such that weak (dispersive) interactions, i.e., interactions comparable to those acting between the molecules themselves so that there is not a breakdown of the chemical molecular bond (chemisorption), it is not possible to retain a substantial quantity of molecules on the adsorbent substrate. Since the retention of the molecules by means of chemical bonding (chemisorption) implies temperatures for the hydrogen release too high for the practical applications, it is compulsory to find microscopic mechanisms of molecular trapping going beyond those present in conventional sorbents.

By means of a concurrent use of neutron scattering techniques and adsorption measurement, we have been able to identify novel mechanisms that contribute to a substantial increase of the hydrogen storage capacity of the corresponding substrates. More specifically, we have observed a kinetic trapping process of the H_2 molecules in certain carbonaceous tubular bundles. During the filling process, the structure expands so that on one hand its nominal capacity increases as the pressure increases, while, on the other hand, the molecules get kinetically trapped in the structure so that an excess of particles are retained in the structure when the pressure is decreased, giving rise to a hysteresis loop in the adsorption/desorption process.

Following the same rationale we started to study materials based in graphite oxide. We have succeeded in the intercalation of simple molecules so that it is possible to "tune" the interlayer space as well as the tortuosity of the pores among the "pillars". We hope in such a way to develop efficient materials in trapping interesting molecular species, in particular H_2 .

MICROSCOPIC STRUCTURE AND DYNAMICS OF DISORDERED CONDENSED MATTER

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

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

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

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

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

PREPARATION OF METAL NANOPARTICLES

The preparation of metal nanoparticles (NPs) with plasmonic properties has been a priority line of the group during this period. We have devoted special attention to the NPs with morphologies that lead to high electromagnetic field enhancements. To accomplish this, it has been established experimental conditions that lead up to this kind of morphologies. The strategy followed to prepare these systems was: a) Fabrication of NPs giving rise to high electromagnetic field intensities, like triangular nanoprisms and nanostars; and b) the association of spherical NPs by using bifunctional molecules that lead to the formation of highly effective interparticle cavities or hot spots, where the Raman scattering is markedly enhanced. Different preparation protocols were assayed in order to improve those already described in the literature. To carry out this task bifunctional molecules as diamines, dithiols, aliphatic dicarboxylates and aromatic dithiols have been used. The characterization of all these systems was carried out by means of Plasmon resonance, TEM, SERS and SEF.

In this line, we have proceeded to the fabrication of mixed metal systems core/shell, which combines the plasmonic properties of both metals, preserving the characteristics of the metal surface to the outer layer. For instance we have successfully manufactured Ag/Au and Pt/Au systems by reduction of Ag and Pt on Au nanoparticles, respectively. These systems are characterized by plasmon resonance, microscopy (TEM, SEM and AFM), and SERS. The use of molecular markers or sensor systems, which are adsorbed through a different mechanism on the different metal outer layer, has yielded valuable information about the distribution of metals in the resulting particles and determine their effectiveness in SERS.

Also, within this line, we have carried out the nanofabrication of core/shell systems consisting in magnetic nanoparticles coated with Ag and Au, thus resulting systems where the metal plasmonic properties used to cover (shell) are combined with the magnetite magnetic properties of the core. These systems have been characterized by spectroscopic techniques like UV-visible absorption, IR and Raman microscopy, TEM, X-ray diffraction and magnetization measurements.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: NANOSENSORS

As in previous years, an important part of the work done in our group during 2010 was devoted to the functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules. The functionalization can significantly increase the sensitivity and selectivity of the nanostructures formed, thus obtaining the high-performance surfaces by combining the physical properties of the metal substrate with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Additionally, these molecules may lead to a biocompatibility of these NPs, what is in turn advantageous for different medical applications, and to govern the self-assembly of these NPs.

Functionalization with host or receptor molecules such as calixarenes and cyclodextrins has been possible thanks to the inclusion in these molecules of chemical groups displaying a high affinity for metal surfaces such as the group dithiocarbamate (DTC). The DTC group has a high affinity for Au and Ag, which has enhanced the efficiency of the functionalization, resulting in metal systems/assembler with high performance in detecting contaminants, for illicit drugs and doping in sport. The detection of these analytes is possible by the existence of hydrophobic cavities in these hosts, in which the molecules to be detected can be accommodated. Recently, we have started to use other kind of inclusion hosts: the cucurbiturils, applied in the detection of pesticides.

Another group of molecules previously used in the functionalization of metal surfaces, the viologens, whose activity is related to their host properties as electron acceptor, were used in the detection of contaminants such polycyclic aromatic hydrocarbons, which act as electron donors. The viologen interact strongly with the metal through ion-pair or charge transfer complexes between viologen and previously attached to the metal halide. During this period lucigenin was applied in multivariate detection. The huge selectivity of lucigenin and the SERS spectra may lead to a univocal identification in mixtures of pollutants. In particular, this was assayed in mixtures of polycyclic aromatic hydrocarbons. The bifunctional viologen dramatically improves the performance of these substances to act as creators of interparticle spaces with high electromagnetic field enhancement (hot spots), and also by acting as contact assemblers. This work was made in the frame of an Associated Unit with the University of Malaga.

Finally we have studied the functionalization molecules using bifunctional molecules with aliphatic character (diamines, dithiols and aliphatic dicarboxylate), as well as with aromatic character (phenylene dithiols and diisocyanides). The last compounds are also able to induce the formation of hot spots by NP-NP associations, with high performances in the detection and catalysis of substrates localized inside these cavities. All these works were

done in collaboration with researchers of the University P. J. Safarik of Kosice (Slovak Republic) and with researchers of the University of Hokkaido from Sapporo (Japan).

INTERACTION BETWEEN METAL NANOPARTICLES AND BIOMOLECULES

Methods for the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility were also tested during the last year. In this sense, we conducted a study of the adsorption of peptides of varying sequence and different polarity and hydrophobicity to evaluate their affinity for metal surfaces. In particular, our attention was focused on studying the adsorption of cysteine and cystine, two amino acids with thiol groups and disulfide bonds, whose stability has been studied in the presence of Ag and Au. This work was carried out in collaboration with researchers from the University of Paris XIII.

Related to the latter research we have also conducted the study of the adsorption on metals of high biological significance proteins such as human and bovine albumin and myoglobin, an important protein related to the oxygen transport and storage in muscles. Methods have been tried to increase the affinity of peptides and proteins by metal surfaces employed in SERS, namely we have accomplished the functionalization of NPs with polysaccharide compounds having a high affinity for metals, such as chitosan and alginate. This work has been done in collaboration with researchers from the University of Chile and the University of Florence.

The last year, we continued the research dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques. In this area we have carried out a study of the adsorption on metallic NPs of humic substances and melanins, which result from the digestion processes induced by fungi. In particular, we have conducted a SERS / SEF study on humic substances of different origins (soil, leonardite, lignite) on both Ag NPs as on metal electrodes, in order to study the effect of the applied potential on the SERS spectra and SEF of these substances. Finally, we developed a study of the structure of the organic matter and charcoal extracted from forest lands that have suffered a fire, by using Ag NPs. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna and Florence.

We have re-initialized a researching line based on the application of metal NPs in the characterization of anthraquinonic natural substances with potential antitumor properties. In particular, this study has focused on parietin, a pigment present in lichens of *Xanthoria parietina* genre. In addition, we have also conducted a study of the distribution of pigment in the leaves of these lichens by Raman imaging. This work was done in collaboration with the Department of Biophysics of the University PJ Safarik in Kosice (Slovak Republic),

Recently, we have started a new line of work also in collaboration with Department of Biophysics, University PJ Safarik in Kosice and the Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, consisting of the study by SERS and SEF of thioflavin dye SEF and its interaction with amyloid peptides. The interest of this research resides on the fact that the latter compounds are considered precursors of the Alzheimer's disease. This study aims at characterizing the changes in the structure of the dye in the complex with amyloids, in order to carry out the detection of small quantities of the dye, which may allow the detection of low amounts of amyloid compound, leading to an early detection of the disease.

SURFACE-ENHANCED FLUORESCENCE ON METAL SURFACES (SEF)

During this past year we have continued with the technical implementation of the SEF (Surface-enhanced Fluorescence) on NPs in colloidal suspension. This method has allowed the study of adsorption and aggregation of drugs, especially antitumor drug emodin, and anti-inflammatory drug piroxicam on metal nanoparticles. It has also been found that the functionalization of metal nanoparticles SEF is crucial, since the intensification of fluorescence requires a certain distance of the fluorophore on the metal. The interaction of these drugs with albumin results in a consequent increase in the SEF spectra, along with the SERS spectra, circular dichroism spectra and fluorescence lifetime have led to important results on the structural changes undergone by these systems once adsorbed on the metal surface. In particular, we have studied the fluorescence quenching that the drug undergoes in the complex with albumin and in the presence of AgNPs, and the different contributions to this quenching from the so-called static and dynamic quenching mechanisms.

Besides, as a part of MICROSERS project supported by Comunidad de Madrid, a new collaboration with UAM has been established in order to design new systems for controlled release of drugs. These systems are based on porous silicon. The preliminary results obtained have been satisfactory since we could detect the antitumoral agent emodin by SEF using this method of infiltration.

This line of investigation is being conducted by Prof. M^a Paz Sevilla.

NANOSENSORS BASED ON SERS FOR DETECTION OF DRUGS USED IN SPORT DOPING

We have made significant progress in the research involving the application of SERS technique for detection and characterization of drugs used in sport doping (DSD). This research was the basis of the PhD work of Irene Izquierdo. During 2011 significant results have been published regarding the SERS study of β -agonists clenbuterol, salbutamol and terbutaline, and aminoglutethimide, an aromatase inhibitor used in athletes to avoid muscle loss. The use of Ag NPs shaped triangular prisms lead to much lower detection limits of these compounds to levels not detected by conventional techniques up to now. In this regard, a comparative study of the efficacy of NPs with different nature and morphology was performed. Also, since the SERS detection of DSDs can be done univocally by SERS spectra, which represents actual fingerprints of these compounds, a multicomponent analysis or mixtures of these doping agents is also possible. Furthermore, this study was also carried out together with a theoretical study of the vibrational modes of the doping agents. In addition, from the adsorption isotherms of the investigated drugs on metal NPs, it was possible to obtain important structural parameters of these molecules, such as the adsorption constant on the nanostructures employed, the detection limit, the SERS enhancement factor and the maximum SERS signal. Likewise, it was successfully finished the SERS study of some doping drugs of difficult study, such as nandrolone, thanks to the synthesis of a cyclodextrin with enhanced affinity towards the surface of Ag by derivatization with DTC. The spectra analysis has allowed important structural information about the mechanisms of interaction between the DSD and host linked on the surface. This research finally gave rise to a patent that is currently under consideration by the Technology Transfer Office of CSIC.

LASER TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY AND CONSERVATION AND RESTORATION OF WORKS OF ART AND MONUMENTS

Within this line of research it was completed the work involving the application of SERS and SEF spectroscopy to the study of synthetic high performance organic pigments carried out by the PhD student Elena del Puerto. The pigments studied in this work were several quinacridone derivatives, known for their durability, partly due to its high insolubility in aqueous media, what makes very difficult to address their characterization by spectroscopic techniques. To accomplish this, we have firstly determined the optimal conditions for carrying out the dispersion of these molecules. This was done by using as dispersant agents functionalized calixarenes with different sizes (from 4 to 8 benzene rings), finding a good correlation between the cavity of the host molecule and the size of the pigment. The adsorption of these molecules on metals by Langmuir-Blodgett films also allowed their characterization, as well as their study by SERS and SEF as a function of the distance of the pigment with respect to the surface. During this year we have completed the study of two new derivative quinacridone pigments with a great interest in the development of OLED (Organic Light Emission Diodes), which began to be characterized the previous year. These derivatives were dichloroquinacridone and dimethylquinacridone, whose characterization has been carried out by the spectra corresponding SERS and SEF. In some cases it was necessary the use of other dispersing agents such as alkyllic and imidazolic ionic liquids, as well as α,ω -alkyldiamines, to obtain acceptable SERS spectra.

Raman spectroscopy and SERS techniques have also been applied in the study of pigments contained in ancient Moroccan Islamic manuscripts. In this regard, the application of the SERS technique has been useful in identifying the red and yellow pigments of organic nature, which can not be characterized by conventional techniques due to the high emission of fluorescence of these dyes. SERS spectra obtained from pink red inks of the latter colors revealed the presence of carmine red, which are also present in black inks with reddish hues. This work was made possible by a bilateral collaboration with researchers CNRST CSIC-University Moulay Ismail of Meknes in Morocco.

The SERS technique has been used in the characterization of dark-colored residual substances found in the cave of Lascaux (France). These substances are produced by the combined action of microorganisms on the paint that are in the walls of this cavern. The SERS technique has allowed the identification of these compounds, due to attenuation of the fluorescence, leading to the structure of these materials, so that the origins of such degradation can be understood. This project was conducted in collaboration with Prof. C. Saiz-Jimenez of IRNAS (CSIC).

During the latter year we continued with the application of Raman spectroscopy in the characterization of molecular organic additives traditional and commercial. While traditional additives (egg, sugar, etc.) have a known structure, the structures of the commercial additives are very complex, being a mixture of several compounds and therefore difficult to interpret. The modification of the hydration process of traditional binders with different additives has been studied by Raman spectroscopy, analyzing the different polymorphic forms of CaCO_3 resulting from the presence of the additive. With respect to commercial additives we are still working on obtaining the SERS spectra of these for their identification in hardened materials. The recovery of waste water treatment plants and paper industry as a feedstock for the production of new materials is done in collaboration with the Department of Synthesis, Characterization and Materials Recycling IETcc. In the case of using paper pulp, new types of hydrotalcites crystalline phases have been identified by Raman spectroscopy.

Finally, we have also conducted a work in collaboration with the group of Ablation Plasma Spectroscopy to obtain synthetic glass (fulgurites) in building materials silicon base by applying continuous and pulsed lasers and subsequent identification by laser ablation techniques (LIBS) and Raman. Preliminary results show that irradiating with continuous CO₂ lasers fulgurite-like materials are generated bearing a composition similar to those found in nature.

INFRARED AND RAMAN BIOSPECTROSCOPY

We have continued this research line by measuring infrared and Raman spectra of blood fractions from sixty subjects, forty three of them affected by Alzheimer's disease and the rest being healthy controls. Following the mathematical treatment of spectra for normalization and baseline corrections, multivariate analysis was performed, particularly ROC curves, discriminant analysis and multilayer neural networks for classification of samples. Classifications of the mononuclear leukocyte fractions were obtained with approximately 85% sensitivity and specificity, generated by infrared amide I bands of protein β -structure. Similar classification results were obtained through the infrared spectra of the plasma fraction by considering the amide I region and the 1150-1000 cm⁻¹ range containing ν CO bands of alcohols and peroxides generated by oxidative stress characteristic of this disease. On the other hand, multivariate analysis of the 800-350 cm⁻¹ Raman region of this fraction allows classification of blood plasma samples with about 90% sensitivity and specificity, due to spectral differences caused by tertiary structure of protein side chains containing tryptophan.

STRUCTURE OF BIOLOGICAL SYSTEMS IN FOOD

In collaboration with the Institute of Science and Technology of Food and Nutrition (ICTAN, CSIC) we have conducted a study related to applications of FTIR spectroscopy aimed at determining the structures of lipids and proteins and their possible interactions in the formation of various oil-in-water emulsions. Particularly, emulsions stabilized with soy protein and other emulsions stabilized with soy protein, sodium caseinate and transglutaminase have been studied. A relationship between the textural and proteolipid structural properties have been found to be dependent on the protein stabilizer system used in these emulsions.

SURFACE INTEGRAL SCATTERING FORMULATION IN 3D

A formulation of this kind has been developed on the basis of the Stratton-Chu equations, for a system of several scatterers with arbitrary shapes and dielectric response. The code is now running for scatterers with arbitrary shapes, thanks to the implementation of flexible surfaces (now using in particular 3D Gieli's superformula). Tests have satisfactorily reproduced the well known: Mie scattering patterns for a single sphere; extended-Mie theory for sphere dimers; other results (FDTD, DDA) for complex shapes (nanocubes).

SERS ON NANOSTARS

We have investigated theoretically the optical properties associated to Localized Surface Plasmons of Ag nanoparticles known as 3D nanostars without axial symmetry (modelled by a supershape). Large field intensity enhancements are obtained at the tips, which make these nanostars specially suitable as (single-nanoparticle) SERS substrates, by hosting molecules for SERS sensing applications. Indeed, we have very recently extended such study to revealing strong LSP in the visible and NIR, and confirming their performance as suitable (single-nanoparticle) SERS substrates. In addition by exploiting genetic optimization algorithms, we have shown that such shapes lead, among a variety of them, to maximized LSP cross sections

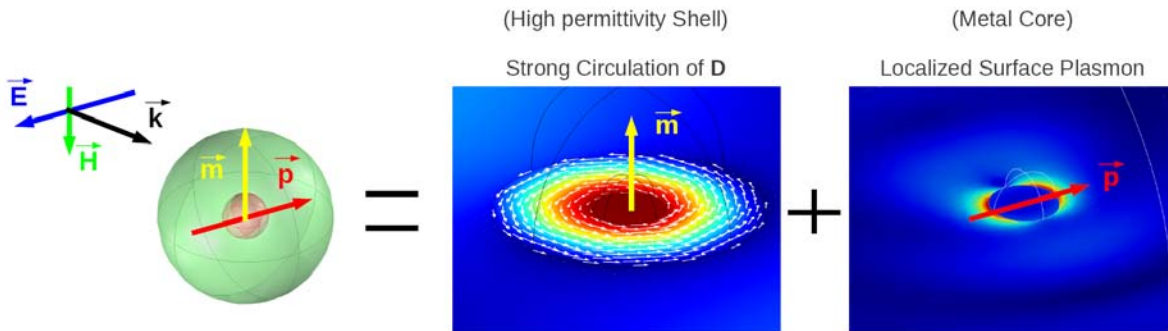
SURFACE PLASMONS ON EFFECTIVE $\epsilon < 0$ ($\mu > 0$) METAMATERIALS

We have investigated the optical properties of media with negative magnetic response ($\mu < 0$), extending the scattering formalism of the Green's theorem to include a discontinuity in the magnetic permeability μ (isotropic and homogeneous), with special emphasis on the phenomenon of enhanced backscattering due to the excitation of s-polarized surface plasmons. Also related to metamaterials, novel metal-dielectric nanostructures have been proposed.

METAL/DIELECTRIC NANOSTRUCTURES METAMATERIAL

We have proposed a simple scheme based on a single nanoparticle with metal core and high permittivity shell, responsible respectively for the electric and magnetic response, thus being intrinsically isotropic and polarization independent; moreover, since the physical mechanism relies on the response of uncoupled, single nanoparticles, no particular arrangement is needed. Indeed, we show that realistic 3D-NIM behaviour is feasible for Silicon or Germanium covers at infra-red frequencies (1.2-1.55 μ m). We believe that the results presented pave the way

towards potential optical metamaterials designed on the basis of the physics underlying our doubly-resonant metalodielectric configuration. These physical principles can of course be exploited at lower (far-IR and terahertz) frequencies, at which some dielectric materials exhibit very large refractive indices and certain materials (e.g. polar crystals, doped semiconductors) behave as plasmonic metals. Finally, it should be emphasized that the required fabrication means will open a novel route towards the nanosynthesis of NIM.



Schematic representation of the physics behind the core-shell configuration. The strong diamagnetic response is due to the lowest, dipolar magnetic resonance in the shell, where the electric field is forced to rotate as a consequence of the abrupt continuity conditions for the normal component between the shell and the surrounding medium. The electric resonance is a LSPR in the metal core.

LASER INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY (LIBS)

We have studied the Laser Induced Breakdown Spectroscopy of CO_2 at different pressures by using high resolution Optical Emission Spectroscopy. The strong emission of the CO_2 plasma shows excited neutral O and C atoms and ionized O^+ and C^+ species. The medium-weak emission is due to electronic relaxation of excited species C^{2+} , O^{2+} , N^+ , N, H and molecular band systems of C_2 , CN, O_2 , O_2^+ , N^{2+} and N^{2+} . Threshold intensities, plasma temperature and velocity distributions for different species were obtained. Electron density in the laser-induced plasma was estimated and from the TOF profiles for distinct species the corresponding three-body electron-ion recombination rate constants were obtained. The laser-induced breakdown spectroscopy of He at several pressures has been studied. The helium breakdown spectrum is mainly due to electronic relaxation of excited He, He^+ and H. Plasma characteristics were examined by the time-integrated and time resolved optical emission spectroscopy. Optical breakdown threshold intensities, ionization degree and plasma temperatures were obtained. The velocity and kinetic energy distributions for He and He^+ species were obtained from time-of-flight measurements. Electron density and its temporal evolution have been used for the estimation of the three-body electron-ion recombination rate constant. A review of some fundamentals of LIBS and some experimental studies developed in our laboratory on gases such as nitrogen, oxygen and air has been done as a book chapter. The physical processes leading to laser-induced breakdown of gases have been analyzed. Optical breakdown threshold intensities in different gases have been experimentally measured. Excitation temperatures and electron number densities are estimated from the intensities and the Stark broadening of several ionic lines. The velocity and kinetic energy distributions for the different species were obtained from time-of-flight (TOF) OES measurements. Temporal evolution of electron density has been used for the estimation of the three-body recombination rate constant. The previous results of LIBS in different samples (He, Ge, GeH_4 and CO_2) have been reviewed for the publication of a book chapter. These works have been done in collaboration with Profs. J.J. Camacho and J.M. Poyato (Physical-Chemistry Department of UAM).

INFRARED LASER INDUCED ABLATION PLASMAS

IR CO_2 Laser Induced Ablation of graphite target has been studied. Analyzes with spatial and temporal resolution for the plasma plume were done. Wavelength-dispersed spectra of the plume reveal the emission of C, C^+ , C^{2+} , C^{3+} , C^{4+} , N, H, O, N^+ , O^+ and molecular features of C^2 , CN, OH, CH, N^2 and NH. Excitation, vibrational and rotational temperatures, ionization degree and electron number density for some species were estimated. This work has been published as a book. Time-resolved optical emission spectroscopy has been applied in the laser-induced ablation plumes of germanium targets. The temporal behavior of Ge atoms and ionized excited species Ge^{3+} , Ge^{2+} , and Ge^+ have been studied. The velocity distributions and the three-body electron-ion recombination rate constants for these

species have been obtained from time-of-flight measurements. The previous results of LIBS in different samples (He, Ge, GeH₄ and CO₂) have been reviewed for the publication of a book chapter.

The laser ablation of Ti and TiO has been studied. Ablation was made in vacuum and in different benzene and hexane atmospheres. The preliminary results show a phase change anatase-rutile in the TiO₂ ablated surface target. For Ti and TiO a dependence of the characteristics of the obtained deposits on the gas pressure is shown. The spectroscopy of the ablation plasmas is not affected by this parameter. These works have been done in collaboration with Profs. J.J. Camacho and J.M. Poyato (Physical-Chemistry Department of UAM) and the participation (Ti and TiO) of Věra Jandová (Institute Chemical Processes Fundamentals of Czech Republic).

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems.
- Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surface interactions.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Rotational energy transfer coefficients by molecular collisions.
- Molecular solidification in cryogenic liquid micro-jets.
- Spectroscopic parameters of molecules of atmospheric relevance.
- Molecular quantum control.
- Molecular alignment and orientation.
- Ultracold quantum gases.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computational methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP.
- Cold plasma generation in low pressure gas discharges.
- Mass spectrometry of ions and neutrals with energy resolution.
- Visible emission spectroscopy of plasmas.
- Langmuir probes for electron energy and charge density measurements.
- Linear Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Undercooled liquid micro-jets.
- Cryogenics.
- Stimulated Raman Spectroscopy.
- Raman-Raman Double Resonance Spectroscopy.
- Frequency-Difference Infrared Spectroscopy.
- Computational methods.

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

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

Molecular physics of atmospheric and astrophysical systems

Around 2006 we initiated the study of solid systems, analogues of astrophysical objects. Since then, we have prepared ice mixtures of water and several molecular systems (CO₂, CH₄, CH₃OH, NH₄⁺, COOH⁻), which are some of the main constituents of comet nuclei and interstellar media particles, and studied them using infrared

spectroscopy and mass spectrometry. By means of a recently acquired cryostat we can extend our experimental range down to 6 K covering a temperature interval very interesting in astrophysics. In the following paragraphs we describe in more detail the main contributions achieved during the last year.

We have initiated a line of research with some astrobiological propensity. The molecule of glycine has been detected on cometary grains, and a comprehensive spectroscopic investigation of this species in different environments and physical conditions was not yet available. We therefore performed a spectroscopic study of glycine in its neutral and ionic structures, isolated and in polar and non-polar environments, and followed changes in its structure for a range of temperatures between 25 and 200 K. To sublime solids with low vapour pressure, like the aminoacid glycine, we have designed and built a mini-oven that allows volatilizing the sample under vacuum and depositing its vapor on a cold substrate. We have also improved the experiment adding a system to rotate the substrate under vacuum. We will continue this line, applied to other biological species.

Concerning astrophysically relevant molecules, carbonic acid has been claimed to exist in different environments, as for example in Mars atmosphere or forming part of cometary comae. For the first time, we have observed this molecule in gas phase in the laboratory. This experimental and theoretical study has been done in collaboration with Dr. Grothe's and Dr. Lortiang's groups from Vienna and Innsbruck Universities respectively. This investigation has received a notorious international repercussion being even announced in the web page of CSIC.

Other problem treated in this astrophysical line has dealt with the detection of deuterated water and the D/H isotopic exchange in amorphous and crystalline ice below 150 K. The molecular isotopic distributions hold valuable clues for understanding the properties and evolution of astronomical environments. In our investigation, we conclude that detectable HDO/H₂O ratios may range from a few percent for amorphous samples to a few per thousand in crystalline ice, using the OD stretching band as probe. These relative high lower limits of detection and the appreciable dependence of the band shape on temperature will complicate the interpretation of data from many lines of sight. We have also investigated the structure and spectroscopic properties of the formate ion, HCOO⁻, a species of astrophysical relevance. The formate ion is characterized by its plasticity, adopting several different structures. We have studied the ion in crystals of sodium formate and ammonium formate, and as an isolated species. The theoretical calculations were contrasted by comparison to observed infrared spectra recorded using different techniques.

In the atmospheric line of research, we have carried out, in collaboration with colleagues of the Complutense University and the University of Isparta (Turkey), a theoretical investigation on mixtures of hydrogen chloride, nitric acid and a number of water molecules, from 1 to 6. We have predicted their infrared spectra and studied especially their proton transfer and hydrogen bond characteristics. We have devised a method to classify these clusters in terms of their hydrogen bond strength and degree of ionization. In collaboration with colleagues from Vienna and the UK, we have collected a set of results of the application of different spectroscopic techniques to nitric acid monohydrate, a molecule related to atmospherically relevant species.

In addition to this line, we have performed a theoretical study on the molecular properties of intra-molecular hydrogen bonds, and halogen bondings in the iodo-tyrosine molecule. This investigation was carried out in collaboration with Drs. Gómez and Pacios, from UCM and UPM respectively.

We also continue with the set-up of a new flow chamber dedicated to the production and study of atmospheric aerosols. The chamber is nearly ready and the first results are expected during 2012.

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

Kinetics of cold plasmas and studies on plasma-surfaces interactions

The effect of comparatively small pressure changes ($\sim 0.5 - 3$ Pa), on the characteristics of low pressure hollow cathode dc discharges of H₂, Ar/H₂ mixtures and air has been investigated with a combination of experimental techniques and kinetic models. In all cases, sudden characteristic changes were observed, which have been most useful in the identification of key physicochemical processes in these plasmas.

Isotope exchange in low pressure cold plasmas of H₂/D₂ mixtures has been studied by mass spectrometry of neutrals and ions, and kinetic modeling. These plasmas are of interest in fusion devices and in interstellar chemistry, as well as in technological processes involving the deposition of hydrogen containing films. The measurements, which include also electron temperatures and densities, have been performed in a stainless steel hollow cathode discharge reactor at different pressures and relative compositions. The data have been analyzed with a model developed by us, showing good global agreement. The dissociation of the fuel gas molecules is followed by wall recycling, which regenerates H₂ and D₂, and produces HD. Atomic recombination at the wall is found to proceed through an Eley-

Rideal mechanism, with a preference for reaction of the adsorbed atoms with gas phase D atoms. Concerning ions, the triatomic H_3^+ , H_2D^+ , HD_2^+ and D_3^+ , produced primarily in reactions of diatomic ions with molecules, are dominant.

The kinetics in low pressure (0.8–8 Pa) plasmas of $\text{H}_2 + 10\% \text{N}_2$ mixtures has been investigated too, using the former diagnostic techniques. The data analysis with a kinetic model has allowed identifying the main mechanisms responsible for the observed distributions of neutrals and ions, and their evolution with pressure. The chemistry of neutrals is dominated by NH_3 formation (up to 70% of remaining N_2) at the metallic walls of the reactor through successive hydrogenation of N and nitrogen containing radicals. Eley–Rideal and Langmuir–Hinshelwood mechanisms are needed to account for the observed NH_3 concentrations. The plasma ionic composition, entirely due to gas-phase processes, results from a competition between direct electron impact ionization, which depends on electron temperatures, and ion–molecule chemistry. At 0.8 Pa, H_3^+ , N_2H^+ and NH_4^+ produced from protonation of the precursor molecules, and H_2^+ and NH_3^+ , coming from direct ionization, are found in comparable amounts. At 8 Pa, collisions of H_3^+ , NH_3^+ and N_2H^+ with NH_3 are to a great extent responsible for the final prevalence of NH_4^+ .

Besides, an overview of the main chemical processes which take place in cold plasmas generated in glow discharges, both in the gas phase and at the surfaces in contact with the plasma has been done. Illustrative examples have been provided. Most common plasma characterization techniques have been also briefly reviewed.

Dynamics and kinetics of chemical reactions and laser induced processes

The study of the the dynamics of proton (or deuteron) exchange $\text{D}^+ + \text{H}_2$ and $\text{H}^+ + \text{D}_2$ reactions has been pursued with special emphasis on the simulation of the whole set of measurements on cross sections and rate coefficients gathered for these systems since the eighties. The results of this comprehensive comparison will be presented in the near future. Rate coefficients for the mass extreme isotopologues of the $\text{H}+\text{H}_2$ reaction, namely $\text{Mu}+\text{H}_2$ and $\text{He}\mu$ $+\text{H}_2$, where Mu is muonium and $\text{He}\mu$ is a He atom in which one of the electrons has been replaced by a negative muon, have been calculated using both accurate quantum mechanical (QM) and quasiclassical trajectory (QCT) methods and compared to recent experimental measurements and to calculations by Fleming et al. (Science 331, 448, 20211). The QCT method can reproduce reasonably well the observations if the trajectories are weighted with a Gaussian function favoring their proximity to the right quantal vibrational action. The analysis of the results shows that the large zero point energy of the MuH product is the key factor in the large kinetic isotope effect observed. These works have been carried out within the framework of our “Unidad Asociada de Química Física Molecular”, which includes groups from the “Universidad Complutense” and the “Instituto de Química Física Rocasolano”. Laser induced processes have also been investigated in the context of this collaboration. The generation of high order harmonics from metal plasmas was studied using 1 kHz laser pulses. The dynamics of the H atom transfer reaction in the photodissociation of pyrrole-ammonia clusters was investigated using the technique of velocity map imaging. The results were found to favor a mechanism based on the direct NH bond rupture. A combined experimental (slice imaging) and theoretical (multisurface wave packet) study of the 304 nm photodissociation of CH_3I was also carried out. The analysis of the results evinced a concurrence of adiabatic and non-adiabatic channels in the dissociation process.

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

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

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

Along the last eighteen years, we have built at the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics two complete instruments for jet diagnostics, whose performance and flexibility are unique worldwide. One of them (A) is devoted to the study of cohesive collisions and liquid jets, and the other one (B) to inelastic collisions. Some improvements have been carried out along 2011 on these instruments to suit the experiments. In this regard, a new system of three motorized microactuators to move the nozzle along an arbitrarily tilted path, with a resolution better than 100 nm, has been installed on instrument (A). This is of great help for the Raman spectroscopic study of undercooled liquid microfilaments produced from glass capillary nozzles cooled by liquid He, which are rarely collinear with the nozzle. On the other hand, we have acquired a special vacuum group for instrument (B), to pump

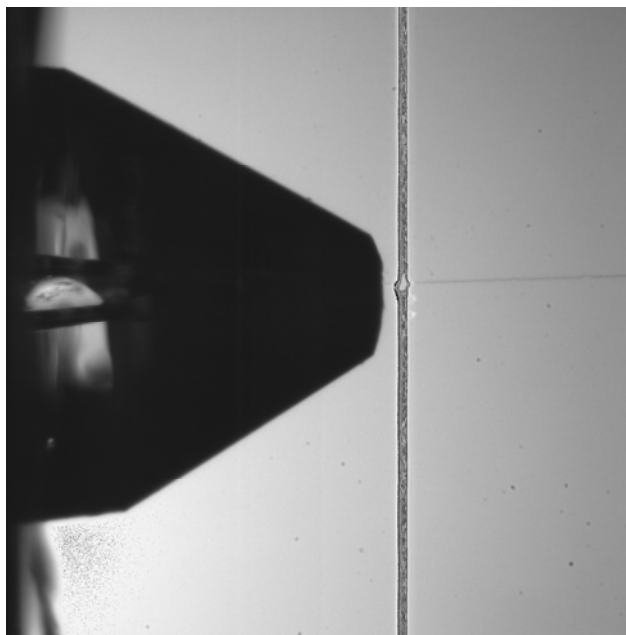
pure oxygen from stagnation pressures about 10 times higher (~ 2 bar); with these pumps we expect the jet to reach rotational temperatures between 4 and 10 K, as well as to observe the formation of dimers and small O_2 clusters. We have purchased and installed a new controlled evaporator-mixer to produce jets of gaseous mixtures of H_2O diluted in He or H_2 , since their collisions, of astrophysical interest, are the subject of current research projects.

We have also built an ortho-para hydrogencatalytic converter, improving an original design from the Max-Planck-Institut für Strömungsforschung in Göttingen (Germany). This new converter can operate with steady flow rates up to 5.4 g/hour, yielding less than 0.4% residual ortho- H_2 . Such a high purity is critical for the experiments on condensation, since small amounts of impurities can significantly affect the nucleation rate. A second "uncatalyzed" line through the converter can be used as a cryogenic trap for preparation of mixtures. It must be stressed that much of the necessary high precision parts have been machined in the Mechanical Workshop of CFMAC, whose support has been essential. Our laboratory has now two converters, which allowed conducting the experiments on mixtures of para- H_2 and ortho- D_2 described below.

Liquid microjets (filaments) of para- H_2 and ortho- D_2 mixtures at 2%, 20% and 50% were produced on instrument (A), in a joint project with the University of Frankfurt (Germany). These filaments, 2 to 5 microns in diameter, are cooled by surface evaporation in vacuum, producing liquid samples highly undercooled below their melting point, until they solidify or break into droplets. Series of Raman spectra at different axial distances have been recorded on these filaments, monitored by laser shadowgraphy, allowing us to track the crystallization with a time resolution of ~ 10 ns. It was found that small amounts of ortho- D_2 impurity delays significantly the crystallization rate of para- H_2 , a quantum effect not previously observed.

On instrument (B) we have measured series of supersonic jets of pure H_2O from a 350 micron nozzle at stagnation temperature $T_0 = 398$ K and pressures from $p_0 = 40$ mbar to 400 mbar, in order to study the $H_2O:H_2O$ inelastic collisions. These measurements eventually showed that H_2O condensation is always present for $p_0 > 40$ mbar, disturbing the thermal evolution of the jet and preventing the quantitative analysis of collisional kinetics. We have also measured condensation-free mixtures of 5% H_2O in He, reaching rotational temperatures of 36 K, the lowest so far. These experiments are expected to yield valuable quantitative information on the $H_2O:He$ collisions. To this regard, some preliminary values of transfer rates by $H_2O:He$ inelastic collisions have been calculated by the group of Theoretical Molecular Interactions and Dynamics of the Instituto de Física Fundamental CSIC, which works in close collaboration with us.

In the methodology section, we have confirmed the inadequacy of current models (based on the isentropic approximation of an ideal gas) for an accurate description of the fluid dynamics of supersonic jets. Therefore, we have developed "ex novo" a fluid dynamics theory, based on the rigorous physical principles of mass, momentum and energy conservation, treating the expanding gas as a real gas, with no idealization. This treatment can bridge from continuum mechanics to quantum mechanics in a rigorous way, and describes the gas media at the molecular level more adequately than through the intractable generalized Boltzmann equation. The theory reveals two dominant regimes in the jets, depending on whether the transfer of energy by inelastic collisions is "easy" or "difficult". The resulting fluid dynamic equations allow to interpret in a natural way the gradual breakdown of thermal equilibrium along the jet, quantifying its properties in terms of collisions through the novel concept of gas-dynamic heat capacity, which only at equilibrium converges into the conventional one. The developed theory also shows unambiguously that supersonic jets are not isentropic, although this approach may be useful under certain conditions, which are now clearly defined.



Liquid hydrogen filament (5 micron in diameter) at 15 K temperature, crossed by the exciting laser at 100 micron off the nozzle

LASER SPECTROSCOPY

The bulk of the work carried out during 2011 in the Laser Spectroscopy line has been done using the Stimulated Raman Spectroscopy Technique in different configurations, studying several molecular species relevant in different fields. The first one of those is $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$, an isotopologue of acetylene that has been studied within the framework of an already well established collaboration with the University of Bologna. The main goal of this collaboration is the precise modelling of ro-vibrational energy levels in the whole family of “common” isotopologues (mono- or doubly- substituted with ^{13}C and D) of acetylene. In 2011 we have obtained room temperature stimulated Raman spectra of the ν_1 , ν_2 , $\nu_2+\nu_4-\nu_4$, $\nu_2+\nu_5-\nu_5$, $\nu_2+2\nu_4-2\nu_4$, $\nu_2+2\nu_5-2\nu_5$, $\nu_2+\nu_4+\nu_5-\nu_4-\nu_5$ bands of this molecule. Moreover, using the Raman-Raman double resonance technique we have also recorded the Raman spectrum of the $2\nu_2-\nu_2$ hot band at 160 K in non-rotational equilibrium at different pressures. Besides the information about the energy levels of this molecule, the analysis of these spectra has revealed a $\Delta J=2$ propensity rule for the rotational relaxation of this molecule. This propensity rule has been already observed for diatomic molecules, but it had not been observed before in a polyatomic, making this observation relevant enough as to be published as rapid communication in the JCP. The analysis of the rest of the bands has also been successfully finished and the results have been published separately.

The next studied species has been $^{12}\text{CF}_4$, a molecule that raises interest in atmospheric studies due to its large global warming potential (GWP) some 6000 times bigger than that of CO_2 , and its 50000 year lifetime in the atmosphere. We have obtained high resolution Raman spectra at room temperature of the ν_1 , $2\nu_1-\nu_1$, ν_2 , $2\nu_2$, $\nu_1+\nu_4-\nu_4$ and $3\nu_2-\nu_2$ bands, and 150 K spectra of $2\nu_1-\nu_1$ and the extended ν_2 band. The analysis of all these spectra is being done at the University of Burgundy by our colleague V. Boudon.

We have also concluded and published a study of the ^{13}C -substituted ethane ($^{12}\text{CH}_3-^{13}\text{CH}_3$) whose analysis has been done in collaboration with Prof. N. Moazzen Ahmadi of Calgary University, and another study on the N_2 molecule for which we have measured with high precision the broadening by self-collisions at different temperatures.

In the Difference Frequency Infrared laboratory, we have developed a method of precise wavenumber measurement using a transfer cavity and an I_2 locked Ar^+ laser as absolute reference. The termination of this system is pending of the procurement of a commercial wavemeter with an accuracy of 10 MHz. We have completed a preliminary assessment of the performance of the system, yielding a S/N better than 1:2000. The accuracy of the wavenumber scale in this preliminary stage is $\sim 2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, taking as reference the most accurate available frequencies for the P(7) multiplet of the ν_3 band of CH_4 measured with an optical frequency comb.

Also in this laboratory we have started the set-up of an experiment aimed towards the acquisition of high resolution stimulated Raman spectra with cw-lasers inside a new type of optical fibers: hollow core photonic crystal fibers (HCPCF). The guiding mechanism in these fibers (the photonic band-gap effect) makes it possible to design a low-

loss hollow core fiber, amenable to be filled with a gas sample. The high degree of light confinement together with a longer interaction length has led to the conception of a new experimental configuration to carry out high resolution Raman spectroscopy without pulsed lasers. Finally, we have observed the first Raman signals with an spectral resolution better than 0.006 cm^{-1} and a remarkable signal to noise ratio in the ν_1 band of CO_2 at 100 kPa.

THEORETICAL MOLECULAR PHYSICS

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation

We have studied the control of alignment and orientation of polar molecules in optical lattices, using a combination of static electric field and a pulse train of non-resonant laser pulses. Long-range dipolar interaction strongly affects the macroscopic properties of a quantum gas and this field is very active. The control of the orientation of molecular dipoles provides a handle to control these macroscopic properties.

A very important application of this system is quantum computing. We have found that the inclusion of non-resonant laser pulses allows controlling the entanglement of dipolar molecules in an optical lattice.

For isolated molecules, we have carried on the study of cyclic states for potentials HCP (Half-Cycle Pulse). Those intrinsically asymmetric potentials allow for the direct orientation of dipolar molecules and the cyclic states can be created and controlled adiabatically under appropriate evolution of the control field.

Control of the torsional angles of nonrigid molecules is key for the development of emerging areas like molecular electronics and nanotechnology. Based on a rigorous calculation of the rotation-torsion-Stark energy levels of nonrigid biphenyl-like molecules, we have shown that, unlike previously believed, instantaneous rotation-torsion-Stark eigenstates of such molecules, interacting with a strong laser field, present a large degree of delocalization in the torsional coordinate even for the lowest energy states. Thus, we have shown that adiabatic control of changes on the planarity of this kind of molecule is essentially impossible unless the temperature is on the order of a few Kelvin.

We have also continued the study of energy transfer in light-harvesting complexes (LHC) and the importance of quantum coherence and the back-action of the molecular environment on the energy flow. We have used an exciton model for the energy transfer and calculated the energy-transfer efficiency and the trapping time for the Fenna-Matthews-Olson complex. We have used the model to interpret two-dimensional echo-spectra of this complex. This work has been done in collaboration with the group of Tobias Kramer from the University of Regensburg.

Ultracold Quantum gases

We have studied the momentum generation in a system of atoms at rest in an optical lattice, modulating the lattice with an unbiased time and spatially periodic laser field. . Generation of an asymptotic current at infinite time is only possible when both time and spatial symmetry of the system are broken. Our work shows that by using a tailored potential that does not break time-reversal symmetry it is still possible to maintain a relevant net average current in a time scale that can be fitted to the lifetime of actual experiments. Our model has proven to be both highly controllable and robust. We have studied the effect of particle interaction on this model, and found that a pulsed modulation of the interaction parameter can create and control a persistent current.

We have carried on the study of the use of atom counting as a tool to distinguish strongly correlated phases of ultracold atoms, both for bosons and fermions, in collaboration with the group of Prof. M. Lewenstein from Instituto de Ciencias Fotónicas.

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidence (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- Raman Spectroscopy.
- Micro and nano hardness.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion.
- Capilar extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and tetradetection.
- Dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).

RESEARCH ACTIVITY:

Group of PHYSICAL PROPERTIES AND NANOSTRUCTURE OF POLYMERS

INFLUENCE OF ADDITIVES ON THE NANOSTRUCTURE OF BENTONITE REINFORCED PVC

The nanostructure of 5% bentonite reinforced polyvinyl chloride (PVC) was investigated by means of wide angle X-ray diffraction measurements and results were correlated to the mechanical properties studied under uniaxial tension. Results showed that the morphology, nanostructure and mechanical properties were influenced by the sort of additive added to the nanocomposites (a flame retardant or a pigment dispersant). It was found that the flame retardant additive promoted polymer intercalation and significantly reduced the material roughness. In this case, the nanoplates were arranged parallel to the surface of the molded sheets and this orientation was preserved upon cold-drawing. Young's modulus and yield stress increased significantly for this nanocomposite while strain at failure was slightly reduced, relative to the neat PVC. On the other hand, the pigment dispersant additive was found to promote nanoclay exfoliation, the polymer matrix showing isotropic orientation. Moreover, the addition of clay did not enhance the tensile mechanical properties with respect to the control PVC; the strain at failure was even significantly

reduced. X-ray scattering results suggested that the exfoliated nanoclay acted as stress concentrators, encountering more difficulties in orienting under the action of tensile stress, thus promoting loss of adhesion between the nanoclay and polymer matrix and leading to rapid failure.

RECRYSTALLIZATION PROCESSES IN PET: INTERPLAY BETWEEN STRUCTURE EVOLUTION AND CONFORMATIONAL RELAXATION

The changes induced in the amorphous regions of poly (ethylene terephthalate) as a consequence of recrystallization processes, taking place after cold-crystallization at 100 °C, were analyzed by means of isothermal dynamical mechanical spectroscopy and microindentation hardness. Overall, a recrystallization process at either 115 °C or 125 °C was found to induce an increase of the rigidity within the amorphous domains confined by the crystals. Microhardness measurements carried out at room temperature revealed that recrystallization lead to an enhanced mechanical performance of the amorphous regions. The analysis of isothermal segmental relaxation patterns recorded in a frequency interval of 10^{-3} - 60 Hz indicated the appearance of two distinct contributions, which found correspondence with observations by broad band dielectric spectroscopy on the same systems. The faster one was ascribed to segmental relaxation within the amorphous domains where the confinement by crystals is relatively weak. The slow relaxation mode was associated with regions where the conformational dynamics is strongly restricted by the crystals. A relative increase of the slow process was detected upon recrystallization. A recently developed relaxation function model was employed to estimate the size of the static cooperatively rearranging regions for both, the slow and the fast modes. It was found that this size increased either upon decreasing the temperature or as an effect of recrystallization. In addition, the number of monomers involved in a conformational rearrangement turned out to be significantly larger in the regions associated to the slow mode process.

HARDNESS

An update of “Hardness”, a review chapter in the Encyclopedia of Polymer Science and Technology published in 2003, has been carried out. The article includes the the basic principles of the hardness technique and a description of the various methods employed in the hardness determination with special emphasis on the new generation of depth-sensing instrumentation. The article also includes the latest advances in the application of indentation techniques to Polymer Science and provides a general overview of the correlations between the mechanisms of local deformation and the polymer basic nanostructural entities.

From the experimental point of view, the production by means of spin-coating of a series of amorphous polymeric thin films with varying thickness down to a few nanometers has been carried out. A method to precisely determine the film thickness from nanohardness measurements is under development in order to correlate such values to the viscoelastic properties of the materials.

Group of DYNAMICS AND STRUCTURE OF SOFT AND POLYMER MATTER

STRUCTURE AND DYNAMICS OF SOFT AND POLYMERIC MATTER NANOSTRUCTURED IN THREE DIMENSIONS

Semicrystalline Polymers. Following our research topic aiming to elucidate the interrelation between the intrinsic bulk nanostructure of semicrystalline polymers and the segmental dynamics of the amorphous phase we have shown for the first time that the combination of dielectric with neutron spin echo measurements performed in a model deuterated polymer as poly(ethylene terephthalate) reveals that the dynamics of semicrystalline polymers occurs in an homogeneous scenario similar to that valid to describe the dynamics of amorphous polymers. Accordingly, the intermolecular cooperativity is expected to be rather similar in both amorphous and semicrystalline polymers. The reduced segmental mobility of the semicrystalline polymer is restricted to well differentiate regions, probably in the crystal-amorphous interface. The significant broadening of the dielectric segmental relaxation in semicrystalline polymers can be attributed to the averaging effect of measuring a homogeneous relaxation with similar stretching exponents over an inhomogeneous environment.

Within a similar context, the effects of strain-induced crystallization on the segmental dynamics of vulcanized natural rubber (NR) have been studied by combining dielectric relaxation spectroscopy and wide-angle X-ray scattering. We have shown that segmental dynamics is clearly affected by uniaxial stretching. At low strain levels stretching takes place without crystallization and a dramatic increase of the dielectric strength is observed. This effect is accompanied by an increment of the dynamical fragility since as free volume reduces by stretching more cooperativity is needed in order to accomplish segmental motions. At higher strains crystals develop and the inclusion of segments into the crystalline phase counteracts the dielectric increment. Our results support a

morphological model for Natural Rubber indicating that during strain-induced crystallization shorter chains are progressively incorporated into the crystals while a significant amount of longer chains remains rather coiled.

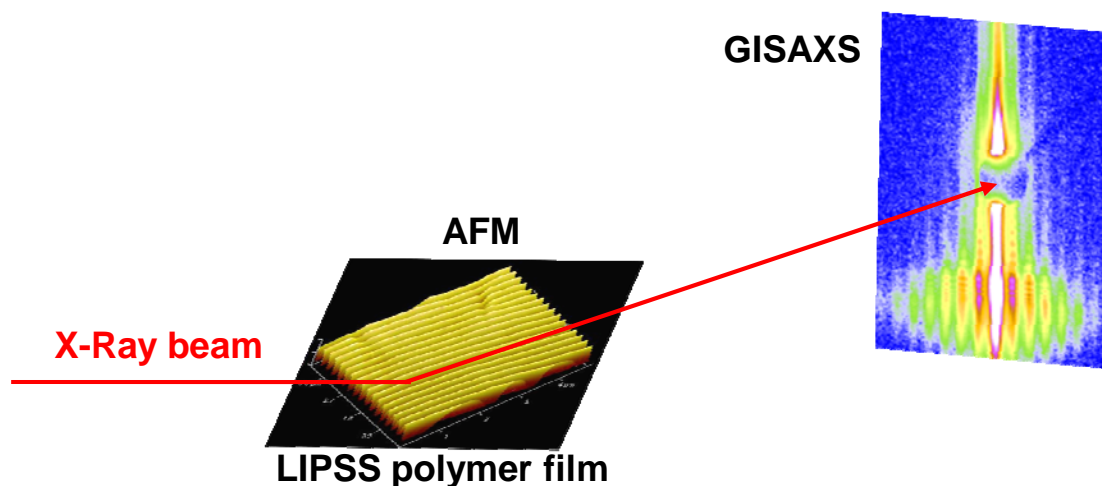
Self-assembly of primary alcohols. The transformation of supercooled liquids into rotational disordered crystals is a well-known example of entropy-driven transitions which, together with standard phase transitions, are present in plenty of natural and daily situations. In this respect, hydrogen bonding alcohols are of special interest. As continuation of previous studies of crystallization of hydrogen bonding systems carried out in SOFTMATPOL we have investigated the complex phase diagram of deuterated ethanol by means of a particular technique that allows obtaining simultaneous structural and dynamic information. Precisely, we have investigated the transformation of ethanol from supercooled liquid into a plastic crystal or rotator phase by means of a particular experimental setup, developed by us, which combines simultaneously dielectric spectroscopy with neutron diffraction techniques. We have demonstrated that, previous to the growth of the body centered cubic (bcc) lattice characteristic of the plastic crystalline phase, the formation of a precursor or intermediate phase through a liquid-liquid phase separation takes place. Once this precursor phase is formed, subsequent (plastic) crystalline nucleation and growth is expected to develop. Our results may be relevant to further understand the well known hydrogen bond network of water responsible of most of its unique properties.

Dynamics of self-assembled block copolymers. The dynamics of di-block copolymers in the phase separated lamellar structure and in the mixed state has been studied by dielectric spectroscopy. By choosing a system in which the glass transition temperatures of the two constituent polymers are not very different, we were able to investigate the differences between hard and soft confinement imposed by the more rigid chains. The results indicate that under hard confinement, the segmental dynamics of the softer component experiences a slowing down due to interaction with the more rigid chains in both separated and mixed phase cases. For the separated phase case no difference in the dynamics of the softer block is observed upon going from the hard to the soft confinement regime. However for the mixed system under soft confinement, i.e. at temperatures higher than the T_g of the more rigid polymer block, a slowing down of the dynamics of the softer block polymer towards the dynamics of the more rigid block is clearly evidenced.

Self assembly of block copolymers. As a continuation with previous years work, we have studied the impact of self-assembling at the nanoscale on the dynamics of block copolymers, by means of different spectroscopies, like dielectric spectroscopy and X-Photon Correlation Spectroscopy. Besides, and in collaboration with the group of Prof. Enrique Vallés from the Universidad Nacional del Sur, Argentina, we are working on the study of the phase diagram of diblock copolymers of polystyrene (PS) and poly(ϵ -caprolactone) (PCL) by simultaneous small and wide angle X-ray scattering (SAXS and WAXS). For rich PS concentrations a certain inhibition of the crystallization of PCL is observed due to the confinement imposed by the phase segregation and by rigidity of PS domains. For all the other concentrations, and due to the high crystallizability of PCL, the phase segregation is partial.

NANOFABRICATION OF POLYMER STRUCTURES

Polymer nanogratings. We have started to exploit the possibilities of using laser beams in order to nanostructure the surface of thin polymer films. In cooperation with the group of Dr. M. Castillejo (IQFR-CSIC) we have succeeded in nanofabricating laser induced periodic surface structures (LIPSS) in a series of strongly absorbing model spin-coated polymer films such as poly(ethylene terephthalate), poly(trimethylene terephthalate), and poly(carbonate bisphenol A), and in a weaker absorbing polymer, such as semicrystalline poly(vinylidene fluoride). We have evaluated the potential of using grazing incidence X-ray scattering techniques in the investigation of this type of systems. Irradiation of the polymer films by laser pulses of 6 ns at a wave length of 266 nm produces characteristic nanogrooves (polymer nanogratings) with period lengths similar to the laser wavelength. We proposed that the nanostructures are formed by devitrification of the film surface at temperatures above the characteristic glass transition temperature of the polymers. The structural information obtained by both atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence small-angle X-ray scattering (GISAXS) correlates satisfactorily. Comparison of experimental and simulated GISAXS patterns suggests that LIPSSs can be well described considering a quasi-one-dimensional paracrystalline lattice and that irradiation parameters have an influence on the order of such a lattice.



Experimental set-up to perform Grazing Incidence Small-Angle X-ray scattering (GISAXS) with synchrotron radiation. The X-ray beam reaches the polymer surface, nanostructured by means of LIPSS, at an angle of total reflection. The evanescent wave propagating along the sample gives rise to diffraction features which are collected on a screen. From the analysis of the structure in real space (AFM) and in reciprocal space (GISAXS) a very complete picture of the nanostructure can be obtained.

Nanoimprint Lithography. We have performed studies on nanoimprint lithography (NIL) in polymers, in collaboration with the group of Professor Francesc Pérez-Murano for Centro Nacional de Microelectrónica (CNM-CSIC, Barcelona). On one hand, the process for stamp preparation was optimized. On the other hand, a study of the underlying physics of the nanoimprint process in polymeric materials is being carried out. The obtained structures are being analyzed by atomic force microscopy and X-ray spectroscopy

Functional Polymer Materials through addition of nanoparticles. Preparation of Composite Materials based on Carbon Nanofibers, Carbon Nanotubes and Graphene. Continuing our cooperation with the company Grupo Antolín Ingeniería, S.A. we have developed nanocomposites based on polyamide 6,6 (PA66) and carbon nanofibers (CNFs) following a new procedure. It consists essentially of the physical mixing, by a vortex mixer, of the polymer matrix, in the form of powder as prepared by cryogenic grinding, and the corresponding amount of CNFs. The materials present good electrical conductivity at lower percolation thresholds than those corresponding to systems prepared by melt compounding, which is the method commonly used in the industry. Part of this study has been patented. In addition, we have prepared composites based on polyvinylidene fluoride (PVDF) and different carbonaceous compounds such as single wall carbon nanotubes (SWCNT), carbon nanofibers provided by Grupo Antolín Ingeniería, S.A., expanded graphite (EG) and graphite. In this case, dissolution has been the synthesis procedure. First, we are studying electrical, thermal and mechanical properties of these compounds and, secondly we will characterize these materials from a structural and morphological point of view, in order to establish the corresponding relationship between structure and properties. Thus, different compounds have been prepared, in a wide range of concentrations, and electrical and thermal studies have been conducted. Interesting differences have been observed mainly as far as electrical properties are concerned.

Within the same context, nanocomposites of Poly (trimethylene terephthalate)(PTT) containing functionalized multi-walled carbon nanotubes (MWCNT) have been synthesized by in situ polymerization method. In comparison with neat PTT, the MWCNTs reinforced nanocomposites possess higher tensile strength and Young's modulus at low MWCNTs loading. In addition, all nanocomposites show reduction of brittleness as compared to the neat PTT. The electrical percolation threshold was found between 0.3 and 0.4 wt% loading of MWCNTs.

During 2011 and in collaboration with the groups of Prof. Z. Roslaniec of the West Pomeranian University of Technology (Szczecin, Poland) and with the group of Dr. M.A. López-Manchado (ICTP-CSIC, Madrid), we have started preparation of Polymer/graphene (expanded graphite) nanocomposites exploring different polymer matrixes. Initial studies indicate achievements of electrical conductivity at very low nanoadditive concentrations. Exploitation of these nanocomposites in order to obtain conducting and transparent materials is going on.

Nanocomposites based on thermoplastic polymers reversibly crosslinked with clay. Following the research line initiated some years ago, we have prepared nanocomposites of clay with some thermoplastic polymers reversibly crosslinked by reactive extrusion: isotactic polypropylene iPP, polyethylene, PE and isotactic polybutene-1, iPB-1 in one step. Some modifications introduced in the preparation method allowed us to improve the properties of the final

product. The clay can be used directly, without any previous chemical modification. One interesting aspect of this method is that some polymeric chains became directly grafted on the clay platelets, thus giving rise, for some compositions, to a complete clay exfoliation. The same method has been applied to the preparation of binary or ternary blends of the polymers above cited, that are normally considered as incompatible. The results obtained are very promising.

Dielectric properties of nanocomposites based on thermoplastic polymers reversibly crosslinked.Wishing to take advantage of our previous experience in this field, we have extended our investigation to some other polymers of increasing interest and wide use, as, for instance, poly(ethylene terephthalate) PET, poly(ethylene naphthalene dicarboxylate) PEN, poly(methyl methacrylate) PMMA, and poly(vinylidene fluoride) PVDF. Moreover, we are especially interested in applying the procedure to obtain nanocomposites in one step to the preparation of nanocomposites of the preceding polymers with clay, graphite, and some other additives. We are making an especial emphasis in the study of the dielectrical properties of the resulting materials.

Polymer/organometallic polymer nanocomposites.We have carried out a deep study on the advanced properties of polymer/organometallic polymer nanocomposites. In particular [Fe(II) (4-octadecyl-1,2,4-triazol)3(ClO4)2] in Polystyrene (PS). Our results confirm that, even in the presence of PS, the structural transition associated to a change in the magnetic susceptibility of the organometallic polymer occurs. This transition is associated to the conversion from lamellar to hexagonal structure in the organometallic polymer. The work has been carried out in collaboration with doctors Daniel López and Rebeca Hernández from Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC) and with Doctor Ana Roig, from Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB-CSIC).

ATOMIC FORCE MICROSCOPY(AFM)

During the last year 2011 the AFM facility has been implemented with a system to measure forces allowing not only visualization but also assessment of mechanical properties at scales of nanometer. The new capabilities will enable to investigate mechanical properties such as elastic modulus, adhesion and deformation forces as well as to perform nanoindentation experiments.

BIOSAX

Characterization of biologically interesting colloids and lipoplexes. We have continued with research on the structuration of mix liposomes formed by a cationic and a zwitterionic lipid in the presence of DNA. By Small Angle X ray scattering we have determined the effect of the lipidic composition in the structure of such lipoplexes and the results have been compared with the theoretical phase diagram with an excellent agreement. This work has been carried out in collaboration with the group of Prof. E. Aicart from the Química Física I department from Universidad Complutense de Madrid.

Research on new compounds and their influence on the assembly of microtubules.By means of X ray and Neutron scattering it is possible to extract information on the conformation of biologically interesting systems, like, as an example, proteins in solution. In collaboration with the group of Dr. F. Díaz from the Centro de Investigaciones Biológicas (CIB-CSIC), we are carrying out SAXS experiments on the influence of new antitumoral compounds based on taxanes on the tubulin assembly. The goal is to understand the mechanism, at atomic and molecular level, of the microtubule assembly in the presence of the mentioned compounds.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

SIMULATION OF PHYSICAL PHENOMENA IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Melt macromolecular dynamics of polyolefins.Full Monte Carlo (MC) and molecular dynamics (MD) atomistic computer simulations of the molecular dimensions and dynamical processes in entangled linear and short chain branched polyethylene chains were designed to establish the effect of the molecular architecture on the diffusion and viscoelastic properties. This strategy allows one to evaluate the density and the intermolecular local packing (chain size) in the melt by mapping of MD simulations on the reptation model of de Gennes and Doi-Edwards. The results obtained illustrate the dependence of the chain dimensions, the entanglement features, and the characteristic relaxation time of the transition from Rouse-to-reptation regimes with the molecular architecture of polyethylene for short chain branching content between 0 and 55 per 1000 carbon atoms. The results are in very good agreement with the experiments in the literature, and more interestingly with those obtained in our group in molecular models of branched polyolefins, characterized by a very homogeneous molecular architecture.

Coarse-grained (CG) potentials to study polymer crystallization. The formation of polymer nuclei is the result of the folding back and forth into stems of the chain perpendicular to the lamellar surface. It is well accepted that experiments cannot track the evolution of the system from the motion of individual polymer chains in the time scale in which the order events may occur. In this line, computer simulations represent an alternative way to shed light on the crystallization mechanisms of polymers. However, the study of polymer crystallization with atomistic computer simulations is a difficult task, since one needs huge computational resources. One way to construct models with less computational effort is to average out the fast motions (an unimportant in the required time scale) removing some of the atomistic degrees of freedom. Thus, the hard atomistic potentials are replaced by mean-force potentials. These potentials are derived from atomistic simulations of small systems by using the iterative inverse Boltzmann method. We have performed studies of the crystallization processes of PVA and PE with different degree of branching. In general, the CG models reproduce the atomistic behaviors and, when possible, the simulations reproduce the available experimental data, i.e. crystallization, density and molecular size as a function of the branches.

Simulation of the isothermal crystallization of polyethylene in presence of nanotubes. The main objective of this work consisted in the study of the carbon nanotube effect on the isothermal crystallization of polyethylene at 300K. This was accomplished by molecular dynamics simulations of pure polyethylene and ethylene/1-hexene copolymers in presence of a carbon nanotube. The nanotube presence offers a contact surface suitable to nucleation and where the crystal growth of the polymer chain is favoured. However, the polymer chain branching limits the crystallite formation even in presence of the carbon nanotube. In general, these nanostructured models showed higher order and crystallinity that can be reflected in an improvement on the mechanical properties of these materials.

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

The study of the physical properties in the melt of molecular models of polyolefins, blends and nanocomposites has allowed study the effects of the molecular architecture in emerging physical properties. The specific properties are especially interesting in the case of blends and nanocomposites, as emerging phenomena seem to be related to specific interactions between the components of the systems. In what the nanostructure and solid state properties concerns, an exhaustive study of the semicrystalline molecular models, blends and nanocomposites has been performed using differential scanning calorimetry, wide angle X-ray scattering and dynamic-mechanical analysis. The results obtained allow getting a deeper understanding about the complex nature of the phase structure of the systems and on the relationship between nanostructure and macroscopic physical properties. Additionally, the crystallization process in dilute solution has been studied by transmission electron microscopy in polyolefin molecular models. This study establishes the strong effect of branching in crystal size and habit, in agreement with our atomistic computer simulations.

SIMULATION OF BIOMACROMOLECULAR SYSTEMS

Simulation of dipeptide amino acids in aqueous solution. Dipeptide amino acids are important molecules because they are suitable models for the protein “bricks”. The study of the predominant conformations of all possible dipeptides is relevant to understand the secondary structural elements of proteins. We have combined umbrella sampling molecular dynamics simulations (USMD) and multiple Bennett acceptance ratio (MBAR) estimators to calculate the intrinsic conformations for each of the 19 amino acids, except proline. Our results confirm that dipeptide extended conformations (P_{II} and β) are more populated than the helical α conformations, that in some cases is opposed to the simulation results in the literature. This difference has been attributed to the combination of USMD/MBAR methodology with OPLS-AA force field. Moreover, our results show a better agreement with recently published propensities obtained by IR and Raman spectroscopy on the same amino acid dipeptides. The hydrogen bonds between water and dipeptides have been widely discussed. We have found that extended conformations have largest probabilities to form H bonds with water than helical ones. In the case of alanine, we have performed high level ab-initio molecular dynamics simulations (Car-Parrinello) to study these nonbonded interactions between solvent and dipeptide. The high level calculations are in good agreement with the results from both USMD/MBAR simulations and experiments. It is worth to point out that this scientific activity started through a publication with a high impact in the media (V. Cruz, J. Ramos and J. Martínez-Salazar, “*Water-mediated conformations of the alanine dipeptide as revealed by distributed umbrella sampling simulations, Quantum Mechanics based-calculations and experimental data*”, The Journal of Physical Chemistry B **115**, 4880-4886, 2011).

ERBB receptors. The aberrant overexpression of some members of the Epithelial Growth Factor Receptor (EGFR or ERBB) family is associated to a poor prognosis in several cancer types, in particular, breast cancer. ERBB2 and ERBB3 are two ERBB family members that are used as biomarkers correlated with more aggressive tumours. These transmembrane proteins are associated to cellular proliferation and growth and are considered important targets for anti-cancer therapies. In our research group, molecular dynamics simulations at an atomistic scale are being done

with the extracellular ERBBs domains in parallel with experimental studies. The objective is to know detailed structural and dynamics characteristics about the receptors in order to design new and more effective therapies.

AS-48 bacteriocin mechanism of action. Small peptides containing α -helix secondary structure have been identified as antimicrobial agents in various organisms. The mechanism by which a soluble peptide is converted to a bacterial membrane bound protein is essential to understand their toxicity. AS-48 is a 70 residue cyclic bacteriocin. It is produced by *Enterococcus faecalis* and is unique by its cyclic structure and its ample antimicrobial spectra including Gram-positive and Gram-negative bacteria. These facts suggest that AS-48 can be a good candidate to a natural food preservative. The primary AS-48 objective is the bacterial membrane where it apparently forms pores giving rise to membrane permeability. In our research group we are carrying out molecular dynamics simulations on systems composed of several AS-48 protomers and lipid bilayer as representative of the bacterial membrane in order to shed light about the bactericidal mechanism of AS-48.

BIOPHYSICS: THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE AND HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

The study of structure and biophysical properties of biomacromolecular complexes as proteins leads to a deeper knowledge about their function in their biological context. With this purpose in mind we have studied proteins implicated in eukaryotic signalling pathways by three dimensional electron microscopy and dynamic light scattering. Our results, obtained in collaboration with other groups at the Department of Crystallography and Structural Biology (IQFR/CSIC) and international laboratories as Sino Biological Ltd. in Beijing, have shown the global dimensions of these macromolecular complexes and have described their spatial arrangement. The macromolecules studied are involved in important cell processes as external signal detection, environment adaptation and cellular transformation. The structural analysis of these biomacromolecules will shed light on how they work into the cell.

FORCE FIELD DEVELOPMENT FOR IONIC LIQUIDS

Ionic liquids (ILs) are salts made from an immense number of combinations of different cations and anions. Thus, ILs can be tailored for desired physicochemical properties which are of great interest for many industrial processes. In the present case, we have investigated the $[\text{EMIM}]^+[\text{B}(\text{CN})_4]^-$ IL due to its attractive thermophysical properties such as a very low viscosity as well as a high chemical and thermal stability. Three united atom force fields were developed for this IL by fitting the electrostatic potential surface of the stable ion-pair configurations using the EA-RESP procedure. Density results were in good agreement with experimental data over a broad temperature range. Refinement of the anionic LJ energy parameters in FF-3 allowed a further improvement of the transport properties closer to experimental data. In the future, the transferability of the developed FF-3 will be investigated for longer alkyl chains of the cation. This work has been accomplished in collaboration with Prof. Ioannou Economou (The Petroleum Institute, United Arab Emirates), Dr. Nuno Garrido (Universidade do Porto), Dr. Andreas Fröba and Mr. Thomas Köller (University of Erlangen-Nuremberg).

TRANSMISSION ELECTRON MICROSCOPY at BIOPHYM

The TEM-BIOPHYM facility has been used to analyze several materials from scientific labs belonging to IQFR, ICTP and IEM (CSIC). The measurements were oriented to shed light on the structural details of nanoparticles, polymeric materials and/or composites of them. The samples were analyzed as single particles dispersed on the grid surface or as ultrathin sections. Following are listed some of the systems studied:

- Platinum, silver, gold and metal oxide nanoparticles.
- Gold nanoparticles coated with silica and magnetite nanoparticles coated with with gold, silver and silica.
- Quantum dots.
- Ultrathin sections of polymeric matrixes with different nanoparticles (i.e. carbon nanoparticles).
- Micelles and polymeric vesicles.
- Nanocomposites of titanium.

The main purpose of these measurements was to know the nanostructure of the nanopartiles particles or their dispersion and organization into the polymeric matrixes.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

Soluciones exactas y cálculos numéricos de gran escala para sistemas fuertemente correlacionados.

Code or Reference: FIS2009-07277.

Funding Institution: MCYT.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich

Duration: January 2009-December 2012.

Objectives: Development of new exact and approximate numerical methods for strongly correlated quantum systems, and the application of these techniques to study exotic phases and phase transitions in nuclei and mesoscopic systems..

Temas de gravedad cuántica: gravedad cuántica de lazos, teorías de derivadas y fenómenos críticos.

Code or Reference: FIS2009-11893/FIS.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Jesús Fernando Barbero González.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: Study different aspects of quantum gravity, in particular problems in loop quantum gravity and perturbative formulations.

Reacciones y Estructuras Nucleares Exóticas.

Code or Reference: FIS2008-01301.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Dr. Eduardo Garrido.

Duration: January 2009- December 2011.

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

Cosmología Cuántica de Lazos, Agujeros Negros y Relatividad Numérica

Code or Reference: FIS2008-060078-C03-03.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2009-December 2011.

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

Loops 11.

Code or Reference: FIS2010-10289-E.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2011-December 2011.

Objectives: Complementary grant for the organization of the international conference Loop 11 in Madrid.

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

Code or Reference: AYA2008-00446.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez.

Duration: 2008-2010

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

COST Action CM0805 “The chemical cosmos; understanding chemistry in astronomical environments”.

Code or Reference: COST Action CM0805.

Main Researcher: Nigel Mason (Open University UK)

Duration: 2008-2012

Objectives: The main objective of this Action is to study chemical processes relevant to the physical conditions encountered in the interstellar medium, and on the surface and in the atmospheres of planetary bodies.

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

Code or Reference: CSD2007-00042.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Antonio Pich Zardoya with participation of the Gravitation & Cosmology and Nuclear Theory Groups of the IEM.

Duration: October 2007-November 2012.

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

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Loops 11.

Company: Fundación BBVA.

Main Researcher: Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: 2011.

Objectives: Collaboration between CSIC and the BBVA Foundation for the organization of the international conference on Quantum Gravity Loops 11.

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

Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas.

Code or Reference: FIS2010-15405.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duration: January 2010- December 2013.

Project Leader: Santiago Sánchez Cortés.

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

Investigation of the interaction of thioflavin with amyloids involved in age-related degenerative diseases by a combined surface-enhanced Raman and fluorescence spectroscopy study.

Code or Reference: 2009SK0006.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-Academia de Ciencias Eslovaca.

Duration: 2010-2011.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Objectives: SERS+SEF characterization of the interaction between Alzheimer marker thioflavin and its biological target, i.e. the peptide amyloid.

Tipología de tintas, colorantes y pigmentos de manuscritos medievales islámicos en Marruecos y en España.

Code or Reference: 2009MA0005.

Funding Institution: Acuerdo CSIC-CNRST(Marruecos).

Duration: 2010-2011.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Objectives: Spectroscopic study of dyes and pigments employed in ancient Islamic manuscripts.

Contribución española a STS2 (Science and Technology Facilities country)-Primer año.

Code or Reference: MAT2008-04191-E

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Javier Bermejo Barrera.

Duration: January 2009-December 2011.

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

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

Code or Reference: CDS2007-00042.

Funding Institution: MEC Consolider- Ingenio 2010.

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

Duration: December 2007-December 2012.

Objectives: To create an Institute for particles, astro-particles and nuclear physics research.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Code or Reference: ACI10-D-000584/IN2P3.

Funding Institution: MICIN-IN2P3.

Main Researcher: IEM, CSIC: M^a José García Borge / CENB, CNRS: Bertram Blank

Duration: January 2010-December 2011.

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

Participación en el Comité ISOLDE del CERN.

*Code or Reference:*FPA2011-13736-E.

*Funding Institution:*MICINN

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: November 2011-October 2012.

Objectives: Participate in committees of the ISOLDE collaboration and in the technical and scientific committee of the HIE-ISOLDE project.

Desarrollo de las herramientas de simulación y análisis del experimento R3B.

Code or Reference: CPAN09-TS12.

Funding Institution: CPAN.

Main Researcher: M^a José García Borge.

Duration: 1st February 2009- 1st February 2011.

Objectives: Responsible for the adaptation of the FAIRRoot analysis and simulation tool in the R3B experiment: a computing programm called R3BRoot.

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

Code or Reference: FIS2007-63065.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Duration: October 2007- March 2011.

Project Leader: José Vicente García Ramos.

*Objectives:*Detection of compounds of environmental interest or pigments of artistic interest at the trace level or single molecules by using metal nanoparticles properly functionalized.

Dinámica y estructura de núcleos exóticos. CALIFA-DB1. Un demostrador del Calorímetro del experimento R3B en FAIR.

Code or Reference: CICYT FPA2009-07387.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2010- December 2012.

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

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

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

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2007-September 2011.

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

Desarrollo de métodos de diagnóstico de la enfermedad de Alzheimer mediante espectroscopía vibracional: identificación y estructura molecular de biomarcadores periféricos y centrales.

Code or Reference: CTQ2009-09538.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: Study the infrared and Raman spectra of blood components as tools for early diagnosis of neurodegenerative diseases.

The study of exotic nuclei using gamma-ray spectroscopy.

Code or Reference: FPA2009-13377-C02-02.

Funding Institution: DGI-MICIN.

Main Researcher: Andrea Jungclaus.

Duration: January 2010-December 2011.

Objectives: Study of exotic nuclei using γ -ray spectroscopy and radioactive ion beams available at leading European laboratories, in particular measurements of magnetic moments of short-lived excited states using transient field techniques.

NANoantenas Ópticas PLASmónicas (NANOPLAS).

Code or Reference: FIS2009-11264.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2010-December 2012.

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

Engineering METamaterials (EMET).

Code or Reference: CSD2008-00066.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

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

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: January 2009-December 2013.

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

Stochastic Optimization of Metallic Nanoantennas for Optoelectronics and Sensing applications.

Code or Reference: PA1002364.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: June 2011.

Objectives: To investigate numerically the stochastic optimization of metallic nanoantennas to maximize plasmonic resonances by combining genetic algorithms and rigorous (surface integral equation) formulations of the scattering of electromagnetic waves.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES II).

Code or Reference: S-2009/TIC1476, Subproyecto IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Project Leader: Subproyecto IEM: Concepción Domingo Maroto.

Coordinator: Juan J. Sáenz, UAM.

Duration: 2010-2013.

Objectives: Development of SERS and SEIRA molecular nanosensors.

Durabilidad y conservación de geomateriales del Patrimonio construido.

Code or Reference: S2009/Mat-1629.

Funding Institution: CAM.

Main Researcher: Rafael Fort González.

Duration: January 2010-December 2013.

Objectives: Study the mechanism and process of weathering of geomaterials and to develop new strategies for its protection and conservation in order to make more durable building material.

Programa de investigación en Tecnologías para la Valoración y Conservación del Patrimonio (TCP).

Code or Reference: CSD 2007-00058.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia., Programa Consolider-Ingenio.

Main Researcher: Felipe Criado.

Duration: 2007-2012.

Objectives: Study of the Cultural Heritage by spectroscopic techniques.

Electrocatalisis de pilas de combustible: electroquímica de superficies y nuevos nanocatalizadores.

Code or Reference: PLE2009-0008.

Funding Institution: MICINN, ACI-PLAN E (cooperación España-Japón Nanotecnología y Nuevos Materiales).

Main Researcher: Angel Cuesta.

Duration: 2009-2012.

Objectives: Study of surfaces with Spectroscopic techniques with possible implications in catalysis and electrochemical processes.

Caracterización y control de nanoestructuras generadas por irradiación láser.

Code or Reference: CTQ2010-15680.

Funding Institution: MCI.

Main Researcher: Marta Castillejo Estriano.

Duration: January 2011-December 2013.

Objectives: This Project aims at obtaining new knowledge on the physicochemical control mechanisms of micro- and nanofabrication of different types of materials using processing techniques based on irradiation and ablation with pulsed lasers in the nanosecond and femtosecond domains.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

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

Code or Reference: FETS.

Company: CDTI - Programa Nacional Del Espacio.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: January 2007- December 2011.

Objectives: Design and construction of a test bank for the development of the next generation of high power protonaccelerator.

Desarrollo de instrumentación para fuentes de neutrones.

Code or Reference: 20101646.

Company: ESS-BILBAO.

Main Researcher: Francisco Javier Bermejo.

Duration: January 2007- December 2011.

Objectives: Design of neutron scattering advance instrumentation.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Microdispositivos ópticos sensores resonantes (MICROSERES).

Code or Reference: S2009/TIC1476, Subproject IEM.

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Subproject IEM: Concepción Domingo Maroto. (IP project: J.J. Sáenz, UAM)

Duration: January 2010-December 2013.

Objectives: Development of SERS and SEF molecular nanosensors.

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

Code or Reference: FIS2007-61686.

Funding Institution: Ministerio de Educación y Ciencia.

Main Researcher: R. Escribano.

Duration: October 2007- March 2011.

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

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

Code or Reference: FIS2010-16455.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: V.J. Herrero.

Duration: January 2011- December 2013.

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

Thunderstorm effects on the atmosphere-ionosphere system.

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

Funding Institution: ESF Research Networking Programme.

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

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

Duration: 9 May 2011-9 May 2016.

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

Molecular Astrophysics: The Herschel and ALMA Era.

Code or Reference: CSD2009-00038.

Funding Institution: MICINN.CONSOLIDER-INGENIO 2010 Program.

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

Coordinator: José Cernicharo Quintanilla.

Duration: January 2010-December 2014.

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

Espectroscopía Láser de Gases de Interés en la Atmósfera o en Procesos de Combustión.

Code or Reference: FIS2009-08069.

Funding Institution: DGI (MICINN).

Main Researcher: José Luis Doménech Martínez.

Duration: January 2009-December 2012.

Objectives: To apply the laser spectroscopy techniques implemented in our Laboratory to the study of gas-phase molecular systems of relevance in atmospheric or in combustion processes. The goal of the studies is to obtain spectroscopic parameters of use in the interpretation of field measurements, and to verify formalisms and potential energy surfaces to advance in the knowledge of the physics of molecular collisions.

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

Code or Reference: FIS2010-22064-C02.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2011-December 2013.

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

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

Code or Reference: HD2008-0068.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: José M^a Fernández Sánchez.

Duration: January 2009-March 2011.

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

Coherent control of molecular states with ultrafast laser pulses.

Code or Reference: DE2009-0088.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Mirta Rodríguez Pinilla.

Duration: January 2010-December 2011.

Objectives: Modelling and analysis of photon-induced charge-transfer in molecules including control by external fields and relaxation processes.

Fenómenos Coherentes En Gases De Moléculas Dipolares Ultrafrías.

Code or Reference: FIS2010-18799.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Mirta Rodríguez Pinilla (Jan.-Oct.), Julio Santos Gómez (from Nov.)

Duration: January 2011-December 2013.

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

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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

Code or Reference: MAT2009-07789.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2010-December 2012.

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

Modelización y simulación de sistemas complejos.

Code or Reference: MODÉLICO-CM(P2009ESP-1691).

Funding Institution: Comunidad de Madrid.

Main Researcher: Enrique Lomba (Main researcher IEM: Tiberio A. Ezquerro Sanz).

Duration: 2009-2011.

Objectives:

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

Code or Reference: MAT2009-12364.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Duration: January 2010-December 2012.

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

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

Code or Reference: MAT2008-03232/NAM.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales.

Duration: January 2009-December 2011.

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

Propiedades viscoelásticas de sistemas poliméricos nanoestructurados mediante nanoindentación

Code or Reference: FIS2010-18069.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Duration: 1st January 2011- 31st December 2013.

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

Estudio de la microestructura de nanocomposites basados en materiales poliméricos modificados mediante extrusión reactiva.

Code or Reference: A/027399/09.

Funding Institution: AECID-PCI (MAEC). Modalidad Mediterráneo.

Main researcher: María Esperanza Cagiao Escotado.

Duration: January 2010-January 2011.

Objectives: Study of thermoplastics polymers reversibly crosslinked by reactive extrusion in the molten state.

Entrecruzamiento reversible de polímeros termoplásticos aplicado a la obtención de sus nanocompuestos con arcilla. Utilidad de este método para la preparación de mezclas de polímeros incompatibles.

Code or reference: C/032183/10.

Funding Institution: AECID-PCI (MAEC). Modalidad Mediterráneo.

Main researcher: María Esperanza Cagiao Escotado.

Duration: January 2011-January 2012.

Objectives: Preparation of nanocomposites of clay with thermoplastics polymers reversibly crosslinked by reactive extrusion in one step. Application of this method to the preparation of blends of incompatible polymers.

Nanocompuestos basados en polímeros termoplásticos reversiblemente entrecruzados. Propiedades dieléctricas.

Code or referente: I-COOP0123.

Funding Institution: Programa "CSIC para el desarrollo", CSIC.

Main researcher: María Esperanza Cagiao Escotado.

Duration: 1st July 2011-30th June 2013.

Objectives: Study of the dielectric properties of nanocomposites based on reversibly crosslinked thermoplastic polymers (PET, PEN, PMMA and PVDF) with different additives: clay, graphite, etc.

Nanostructuring polymers in one and two dimensions.

Code or Reference: II-20100103 EC.

Funding Institution: Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY HASYLAB, Hamburg (Germany).

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: June 2010-June 2012.

Objetives: Structural studies of confined systems by means of grazing incidence X-ray scattering with synchrotron light.

Density fluctuation dynamics in diblock copolymers.

Code or Reference: I-20110191 EC.

Funding Institution: Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY HASYLAB, Hamburg (Germany).

Main Researcher: Alejandro Sanz Parras.

Duration: June 2011-June 2012.

Objetives: Studies on the dynamics of each phase in a block copolymer prior to phase separation.

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

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

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Duration: 2007-2011.

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

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH THE INDUSTRIAL COMPANIES

Study of the effects of molecular composition on the melt and solid state properties of polyolefinic blends.

Company: Dow Chemicals Ibérica.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Duration: Mayo 2011- Abril 2012.

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

Cenit Infnitex: Investigación de nuevas funcionalidades e inteligencia implementadas en textiles.

Company: Francisco Alberro, S.A. (FAE, S.A.).

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: July 2010-.

Objetives:

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES / NATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

III Jerte Advanced Relativity Meeting, Navaconcejo, 3rd-6th of March 2011.

- *Uniqueness of the Field Quantization in Cosmology*(Invited talk), Jerónimo Cortez, Guillermo A. Mena Marugán, José Velhinho.
- *Highway to Hell: Heating up or Cooling down* (Invited talk), L.J. Garay.
- *Gravity Emerges to the Surface* (Oral presentation), Mikel Fernández Méndez.
- *Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology with Matter*(Oral presentation), Mercedes Martín Benito, Daniel Martín de Blas, Guillermo A. Mena Marugán.
- *Prescriptions and Superselection Sectors in Loop Quantum* (Oral presentation), Tomasz Pawlowski, Javier A. Olmedo Nieto, Guillermo A. Mena Marugán.

Programa Embajadores de la Ciencia del MICINN, Logroño, May 2011.

- *Preparándose para ser científico* (Invited talk), E. Moya de Guerra.

VIII Seminario de Investigación Interdisciplinar, Tecnología, Ingeniería y Ciencias Experimentales: Rompiendo fronteras en los estudios de género, Universidad Autónoma de Madrid, May 2011.

- *Avatares y estímulos de una científica española (1969- 2011)* (Invited talk), E. Moya de Guerra.

XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física, Santander, 19th-23rd of September 2011.

- *Aspectos de estructura nuclear en la desintegración beta simple y doble de ^{76}Ge* (Oral contribution), O. Moreno, J. M. Boillos, E. Moya de Guerra.
- *Observables de violación de paridad nuclear en isótopos de Ba: aplicación a experimentos atómicos* (Oral contribution), O. Moreno, E. Navarro, E. Moya de Guerra.

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

VI Congreso Nacional de Ciencia y Tecnología de Alimentos. Valencia, 8th-10th of June 2011.

- *Relationships between Technological and Structural Characteristics of Sausages Enriched with Olive Oil*.(Poster), A.M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, T. Pintado, P. Carmona and F. Jiménez-Colmenero.

Primera Reunión de la Red de Ciencia y Tecnología para la Conservación del Patrimonio (TechnoHeritage), Madrid, 28th-29th of June 2011.

- *Láseres y Nanotecnologías para el Patrimonio Cultural (LANAPAC)* (Oral Contribution), M. Castillejo, C. Domingo, S. Martínez, M. Oujja.
(Conjunta con FM)

I Reunión de Coordinación de Cultura Científica, Madrid, 29th-30th of June 2011.

- *Mis primeros pasos en la investigación* (Poster), S. Martínez-Ramírez y A. Guerrero.

XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física y 21º Encuentro Ibérico de Enseñanza de la Física, Santander, 19th-23rd of September 2011.

- *Diseño mecánico del Endcap del calorímetro γ -p para CALIFA*(Oral contribution and Poster), J. Sánchez Rosado.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

II Encuentro de Exploración del Sistema Solar. Bilbao, 16th-17th of June 2011.

- *Espectroscopia infrarroja de hielos de interés astrofísico* (oral), B. Maté, O. Gálvez, Y. Rodríguez-Lazcano, V. Herrero, and R. Escribano.

Primera Reunión de la Red de Ciencia y Tecnología para la Conservación del Patrimonio (TechnoHeritage), Madrid, 28th-29th of June 2011.

- *Láseres y Nanotecnologías para el Patrimonio Cultural (LANAPAC)* (Oral Contribution), M. Castillejo, C. Domingo, S. Martínez, M. Oujja.
(Together with ENVYMED)

33^a Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. Santander, 19th-23th of September 2011.

- *Diagnostico y modelado de plasmas fríos de H₂ puro y en mezclas con D₂, Ar y N₂*(poster), I. Tanarro, V. J. Herrero, E. Carrasco and M. Jiménez-Redondo.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

V Rnión Nacional de la Asociación de Usuarios de Radiación Sincrotrón de España (AUSE), Valencia, 6-9th of September 2011.

- *Disorder-Order Transition and Nanostructure Control in a Polystyrene-b-Poly (ethyl methacrylate) Diblock Copolymer by Time Resolved SAXS* (Oral communication), Aurora Nogales Ruiz.
- *Combined Atomic Force Microscopy and Grazing Incidence X-ray Scattering Investigation of Nanopatterned Polymer Surfaces* (Póster), Mari Cruz García Gutiérrez, I. Martín-Fabiani, J.J. Hernández, D.R. Rueda, M. Soccio and T.A. Ezquerria.

SOFTMATPOL Winter Meeting2011, Madrid, 22nd of December 2011.

- *Photovoltaics, Polymers, Fullerenes and Nanostructuring...What else?*(Oral communication), Tiberio A. Ezquerria.
- *Síntesis y caracterización (vía AFM) de nanoesferas poliméricas* (Oral communication), Daniel M. Tong.
- *Nanolitografía en polímeros* (Oral communication), Michela Soccio.
- *Espectroscopia dieléctrica en películas poliméricas delgadas empleando espaciadores* (Oral communication), Nacho Martín-Fabiani.
- *Preparación y caracterización de compuestos de polifluoruro de vinilideno y nanoaditivos basados encarbono*(Oral communication), Amelia Linares.
- *Comportamiento PTC en composites de nanofibras de carbono preparados mediante tecnología tape casting* (Oral communication), Beatriz Pina Romero.
- *La adsorción de tolueno en la zeolita ZSM11: Efectos en la estructura* (Oral communication), Alejandro Sanz.
- *Resultados preliminares de los experimentos con microfoco* (Oral communication), Mari Cruz García Gutiérrez.
- *XPCS Experiments: Density fluctuations during phase transition in block copolymers* (Oral communication), Aurora Nogales.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES / INTERNATIONAL CONGRESSES AND MEETINGS

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

International Conference on Many Body Correlations from Dilute to Dense Nuclear Systems, Paris (France), 15th-18th of February 2011.

- o *Integrable Pairing Models with p-wave Symmetry* (Invited Talk), Jorge Dukelsky.

Annual NUSTAR Meeting 2011, GSI, Darmstadt (Germany), 2nd-4th of March 2011.

- o *Description of Nuclear Shape Transitions with a Microscopic Perspective*(Oral contribution), R. Rodríguez-Guzmán, P. Sarriguren, L.M. Robledo.

Third Workshop on Nuclei and Mesoscopic Physics, East Lansing (USA), 5th-9th of March 2011.

- *Integrable Pairing Models with p-wave Symmetry* (Invited talk), Jorge Dukelsky.

APS March Meeting 2011, Dallas (USA), 21st-25th of March 2011.

- *Excitonic Gap from Long-Range Coulomb Interaction in Graphene* (Oral Presentation), J. González.

Loops 11-Madrid, Madrid (Spain), 23rd-28th of May 2011.

- *Loop Quantum Cosmology of the Bianchi I Model: Complete Quantization* (Oral presentation), Luis J. Garay, Mercedes Martín-Benito, Guillermo A. Mena Marugán, Edward Wilson-Ewing.
- *Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology with Matter* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito, Daniel Martín de Blas, Guillermo A. Mena Marugán.
- *Inflation and Inhomogeneities: a Hybrid Quantization* (Oral presentation), Mikel Fernández Méndez, Guillermo A. Mena Marugán, Javier A. Olmedo Nieto.

2011 The molecular Universe. IAU Symposium 280, Toledo (Spain), 31st of May-4th of June 2011.

- *Ab Initio Calculations for the Spectra Analysis of Dimethyl-Ether (CH₃OCH₃) and their Isotopologues* (Poster), M.L. Senent, M. Villa, R. Domínguez-Gómez, O. Alvarez-Bajo, M. Carvajal
- *Silicon-Carbon Chains* (Poster) N. Inostroza, M. L. Senent, R. Domínguez-Gómez.

Nuclear Many-body Open Quantum Systems: Continuum and Correlations in Light Nuclei, Trento (Italy) 6th-10th of June 2011.

- *Complex Scaling Method, Three-Body Resonances, and Decay Mechanisms* (Invited talk), E. Garrido.

Matrix Elements for the Double Beta Decay Experiments (MEDEX'11), Prague (Czech Republic), 13th-16th of June 2011.

- *Selected Topics on Nuclear Structure in Rare Electroweak Processes* (Oral contribution), Óscar Moreno, J. M. Boillos and E. Moya de Guerra.

2011 Workshop Processus Physico-Chimiques en Phase Gazeuse d'Intérêt Astrophysique, Saint Florent, Córcega. 15th-17th of June 2011.

- *Formation of Interstellar Anions* (Invited Talk), M.L. Senent.

Highlights in Quantum Condensed Matter Physics, San Sebastián (Spain), 17th-23rd June 2011.

- *Higgs-like Condensation of Ripples and Buckling Transition in Graphene* (Invited talk), J. González.

Summer Solstice Mini-Workshop on Relativistic Quantum Information, Madrid (Spain), 21st of June 2011.

- *Artificial Black Holes in BECs*, L.J. Garay.

Workshop on New Trends in the Physics of the Quantum Vacuum: From Condensed Matter, to Gravitation and Cosmology, Trento (Italy), 27th of June-1st of July 2011.

- *Artificial Black Holes in BECs*, L.J. Garay.

International Conference on Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems, Constanta (Romania), 27th of June - 2nd of July 2011.

- *Integrable Richardson-Gaudin Models in Mesoscopic Physics* (Invited talk), Jorge Dukelsky.
- *Effects of Strong Correlations on the Transmission Phase of Interacting Quantum Dots* (Contributed talk), Rafael A. Molina, Peter Schmitteckert, Rodolfo A. Jalabert, Dietmar Weinmann, Philippe Jacquod.

Third International Conference on Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics, Prague (Czech Republic), 25th-30th of July 2011.

- *Phase Diagram of the Integrable px+ipy Fermionic Superfluid* (Invited talk), Jorge Dukelsky.

2011 High Resolution Molecular Spectroscopy, 22nd Colloquium HRMS, Dijon, (France) 22nd of August 2011.

- *CCSD(T) Study of Infrared and Raman Spectra of Dimethyl Ether* (Poster), O. Alvarez, M. Carvajal, M. Villa, M.L. Senent, R. Domínguez-Gómez.

Spanish Relativity Meeting ERE2011, Madrid (Spain), 29th of August-2nd of September 2011.

- *Black Holes: Combinatorics and the Thermodynamic Limit* (Invited talk), Jesús Fernando Barbero González.
- *Inclusion of Matter in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito, Daniel Martín de Blas, Guillermo A. Mena Marugán.

- *Complete Hybrid Quantization of an Inflationary Universe with Inhomogeneities*(Oral presentation), Mikel Fernández Méndez, Guillermo A. Mena Marugán, [Javier A. Olmedo Nieto](#).

International Workshop Relativistic Quantum Information North, Madrid (Spain), 6th-8th of September 2011.

- *Hawking Radiation as Perceived by Different Observers* (Oral presentation), [L.J. Garay](#).

International Workshop on Many-Body Quantum Dynamics in Closed Systems: challenges and applications, Barcelona (Spain), 7th-9th of September 2011.

- *Thermalization in an Interacting Spin System in the Transition from Integrability to Chaos* (Contributed talk), [Armando Relaño](#).

6th AEGEAN Summer School, Naxos (Greece), 12th-17th of September 2011.

- *Matter in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology: The Gowdy Model* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito, Daniel Martín de Blas, [Guillermo A. Mena Marugán](#).
- *Prescriptions and Superselection Sectors in Loop Quantum Cosmology* (Oral presentation), Guillermo A. Mena Marugán, [Javier A. Olmedo Nieto](#), Tomasz Pawłowski.

XIX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications. Varna (Bulgaria), 19th-25th of September 2011.

- *Weak Decay Rates in Neutron-Deficient Medium-Mass Nuclei under rp -process Conditions* (Invited talk), [Pedro Sarriguren](#).
- *Topics on Nuclear Structure with Electroweak Probes* (Invited talk), [E. Moya de Guerra](#).

International Workshop on Theoretical Approaches to Correlations in Nuclei at the Limits of Stability, Ho Chi Minh City (Vietnam), 20th-21st of November 2011.

- *Decay Properties of waiting Point Nuclei for the rp Process*(Invited talk), [P. Sarriguren](#).
- *The ^8Be and ^{12}C structure and the Triple-Alpha Reaction Rate* (Oral contribution), [E. Garrido](#).

2011 International Conference on Interstellar Dust, Molecules and Chemistry (IDMC-2011), Pune (India), 20th-24th of November 2011.

- *Formation of Interstellar Anions*(Invited talk), [M.L. Senent](#).
- *Ab Initio Calculations for the Spectral Analysis of Dimethyl Ether ($\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$) and Their Isotopologues* (Poster), [M.L. Senent](#), M. Villa, R. Domínguez-Gómez, O. Alvarez-Bajo and M. Carvajal.

Damping in Granada, Granada, 21st-23th of November 2011.

- *Black Hole Entropy and the Thermodynamic Limit*(Invited talk), [Jesús Fernando Barbero González](#).
- *Uniqueness of the Fock Quantization in Nonstationary Spacetimes* (Invited talk), Jerónimo Cortez, [Guillermo A. Mena Marugán](#), Javier A. Olmedo Nieto, José Velhinho.
- *Unitarity and Uniqueness in the Quantization of Cosmological Perturbations* (Oral presentation), [Mikel Fernández Méndez](#), Guillermo A. Mena Marugán, Javier A. Olmedo Nieto.
- *The Hybrid Gowdy Model: Solvable Hamiltonian Constraint and Inhomogeneous Quantum Cosmologies* (Oral presentation), Mercedes Martín Benito, [Daniel Martín de Blas](#), Guillermo A. Mena Marugán.
- *Inhomogeneities and Inflation in LQC: A Hybrid Approach* (Oral presentation), Mikel Fernández Méndez, Guillermo A. Mena Marugán, [Javier A. Olmedo Nieto](#).

New Frontiers in the Physics of Two-Dimensional Electron Systems, Buenos Aires(Argentina), 22nd-25th of November 2011.

- *Emergence of Universal Behaviour in the Scattering Phase of Quantum Dots* (Poster), [Rafael A. Molina](#), Rodolfo A. Jalabert, Dietmar Weinmann, Philippe Jacquod.

International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2011 (ISPUN11), Hanoi (Vietnam), 23rd-28th of November 2011.

- *Nuclear Shape Transitions in Neutron-Rich Medium-Mass Nuclei* (Oral contribution), [P. Sarriguren](#).
- *Variational Description of Continuum States in Terms of Integral Relations* (Oral contribution), [E. Garrido](#).

16th International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories, Bariloche (Argentina), 28th of November - 2nd of December 2011.

- *Integrable Richardson-Gaudin Models in Condensed Matter and Nuclear Physics* (Invited talk), [Jorge Dukelsky](#).
- *Effects of Strong Correlations on the Transmission Phase through Quantum Dots*(Poster), [Rafael A. Molina](#), Peter Schmitteckert, Dietmar Weinmann, Rodolfo A. Jalabert, Philippe Jacquod.

Paris Working Meeting: keV Scale Sterile Neutrinos in KATRIN and MARE, Paris (France), 5th of December 2011

- *Search of keV Sterile Neutrino Warm Dark Matter in the Rhenium and Tritium beta decays*(Oral contribution), Óscar Moreno, H. J. de Vega, E. Moya de Guerra, M. Ramón, N. Sánchez.

7th International Conference on Gravitation and Cosmology, Goa (India), 14th -19th of December 2011.

- *Black Holes: Combinatorics and the Thermodynamic Limit* (Invited talk), Jesús Fernando Barbero González.

Mini-Symposium on Few- and Many-Body Physics of Atoms and Nuclei, Aarhus (Denmark), 15th-16th of December 2011.

- *The Triple-Alpha Process* (Oral contribution), E. Garrido.

Xth International Conference on Gravitation, Astrophysics and Cosmology ICGAC10, Quy Nhon (Vietnam), 17th-22nd of December 2011.

- *Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology: Approximated FRW Cosmologies from the Hybrid Gowdy Model with Matter*(Poster), Mercedes Martín Benito, Daniel Martín de Blas, Guillermo A. Mena Marugán.

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

MAGISOL: Madrid-Aarhus-Göteborg International collaboration Meeting, Madrid, 12th -13th of January 2011.

- *The HIE-ISOLDE Project* (Oral contribution), M.J.G. Borge.
- *The EUROGENESIS Project* (Oral contribution), M. J. G. Borge.
- Experiments at TRIUMF: E1104: ^{11}Li and S1202: ^{11}Be (Oral contribution), O. Tengblad.
- *CALIFA Front Endcap* (Oral contribution), E. Nacher.
- *^{72}Kr Conversión Electrons* (Oral contribution), J.A. Briz.
- *Study of $^4\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}$ Capture Reaction with Astrophysical Interest* (Oral contribution), M. Carmona.
- *Dynamic Studies of ^{11}Li and its core ^9Li on Lead near the Coulomb Barrier* (Oral contribution), M. Cubero.
- *CALIFA Slow Control* (Oral contribution), A. Perea.

EURISOL Topical Meeting, Valencia (Spain), 21st-23th February 2011.

- *Beta-Delayed Proton-Emission, Exotic Decays in Light Nuclei. Recent Achievements and Future Outlook* (Invited talk), M^a José García Borge.

The 10th International Conference on Alzheimer's and Parkinson Diseases (ADPD 2011), Barcelona (Spain), 9th-13th March 2011.

- *Infrared Spectroscopic Analysis of Blood as a Diagnostic Tool in Alzheimer Disease*. (Poster), P. Carmona, A. Toledano, I. Alvarez, S. Ruiz, M. Molina, M. Calero, P. Martínez, F. Bermejo.

COSTD43: Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology, Madrid (Spain), 29th March -1st April 2011.

- *Structural Changes of BSA-Emodin Complexes Adsorbed on Silver Nanoparticles* (Poster), P. Sevilla, F. García- Blanco, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, J.V. García-Ramos.

IMAGINENANO 2011, Workshop on Photonics, Plasmonics, Magneto-Optics (PPM11), Bilbao (Spain), 11th-15th April 2011.

- *Designing Plasmon Nanoparticles Tailored for Applications in Nanophotonics* (Oral contribution), R. Rodríguez-Oliveros, R. Paniagua-Domínguez, F. López-Tejeira, D. Macías, J. A. Sánchez-Gil.
- *Magnetic Properties of High Permittivity Dielectric Nanoparticles Applied to Optical Metamaterials* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, F. López-Tejeira, J. A. Sánchez-Gil, L. Jelinek, R. Marqués.
- *Plasmon Resonances of Exible Shape Nanoparticles* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil.

Nuclear Physics in Astrophysics V, Eilat (Israel) 3rd-8th April 2011.

- *Astrophysical S Factor for the $^4\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}$ Reaction at Medium Energies* (Poster), M. Carmona.

Workshop on Reactions of Astrophysical Interest (EUROGENESIS), Madrid, 27th -29th of April 2011.

- *Experiments at the CMAM Accelerator in Madrid* (Oral contribution), O. Tengblad, M. Cubero.
- *Study of Beta Decay Properties of rp-Process Nuclei* (Oral contribution), A.D. Becerril.
- *Astrophysical Factor of $^3\text{He}(\alpha, g)^7\text{Be}$ Using Activation Method* (Oral contribution) M. Carmona.

R3B Collaboration Meeting, Darmstadt (Germany), 2nd-6th May 2011.

- *CALIFA Endcap Progress Report* (Oral contribution), [Enrique Nácher](#).
- *R3BRoot GR Event Generator* (Oral contribution), [Enrique Nácher](#).

FUSION11: Surpassing Barriers, Saint Malo (France), 2nd-6th May 2011.

- *Dynamic Studies of ¹¹Li and its Core ⁹Li on Lead near the Coulomb Barrier* (Poster), [M. Cubero](#).

Conference on the Micro-Raman and Luminescence in Earth and Space Sciences (CORALS-2011), Madrid (Spain), 18th-20th May 2011.

- *Laser Induced Artificial Fulgurite Formation: Preliminary Results* (Poster), Sagrario Martinez-Ramirez, Joaquin J. Camacho, Luis Diaz.
- *Preliminary Studies for the Use of Portable Raman in the Identification of Conservation Treatments Applied in the Architectural Heritage* (Poster), Carmen Vazquez-Calvo, Sagrario Martinez-Ramirez, Monica Alvarez del Buego, Rafael Fort.

Advances in Radioactive Isotope Science (ARIS 2011), Leuven (Brussels), 29th May-3rd June 2011.

- M.J.G. Borge (*Member of the Scientific Advisory Committee*).
- *Fast Phoswich Scintillator for Proton and Gamma Detection* (Poster), J. Göran Nyman, A. Heinz, K. Riisager, H. Fynbo, G. Koldste Thinggaard, K. Lind Jensen, M.J.G. Borge, E. Nacher, J. Sánchez del Río, A. Perea, J.A. Briz, M. Carmona.
- *Excited States in ⁷⁹Zn and the N=50 Shell Gap* (Oral contribution and Poster), [R. Orlandi](#).
- *Dynamic Studies of ¹¹Li and its Core ⁹Li on Lead near the Coulomb Barrier* (Poster), [M. Cubero](#).

4th International Conference on Proton-Emitting Nuclei (PROCON 2011), Burdeaux (France), 6th-11th June 2011.

- *Beta-Delayed Particle Emission: Peering into Nuclear Structure* (Invited talk), [M^a José García Borge](#).
- *Phoswich Scintillator for Proton and Gamma Radiation of High Energy* (Invited talk), [Olof Tengblad](#).
- *Beta-Delayed Alpha Particle Emission from the Neutron Deficient Rare Earth Isotopes ¹⁵²Tm and ¹⁵⁰Ho* (Oral contribution), [E. Nácher](#).

International Workshop for Nanoplasmonics on Energy and the Environment, Sanxenxo (Spain), 8th-10th June 2011.

- *Bifunctional Alkanes as Linkers for the Controlled Formation of SERS Hot Spots* (Poster), I. Izquierdo Lorenzo, L. Guerrini, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

6th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS6), Sonoma, CA (USA), 12th-17th June 2011.

- *New Approaches for Employing Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) in the Detection of Quinacridone Derivatives* (Poster), [E. del Puerto](#), C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
- (Conjunta con FM)**
- *SER(R)S and SEF Characterization of N-N'-Dialkylquinacridones Used as Co-Dopants in High Performance Organic Light-Emitting Devices OLEDs* (Poster), [E. del Puerto](#), C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
- (Conjunta con FM)**
- *Surface-Enhanced Raman Scattering of Cucurbit[n]urils (N=6-8) and its Complexes with Viologens* (Poster), [M. L. Roldán](#), S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
- (Conjunta con FM)**
- *Solubilisation of the Anti-Inflammatory Drug Piroxicam on Silver and Gold Colloids: a SERS Study* (Poster), P. Sevilla, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, [J.V. Garcia-Ramos](#).
- (Conjunta con FM)**

Nordic Conference on Nuclear Physics 2011 (NCNP2011), Stockholm (Sweden), 13th-17th June 2011.

- *Nuclear Structure Experiments of AstroPhysical Interest at a 5MV Tandem Accelerator* (Invited talk), [O. Tengblad](#).
- *New Lifetime and Magnetic Moment Measurements in Stable Even-Mass Sn Isotopes* (Invited talk), [A. Jungclaus](#).
- *Transfer Reactions near ⁷⁸Ni: Single-Particle States in ⁷⁹Zn and the N=50 Shell Gap* (Oral contribution), [R. Orlandi](#).

XIII International Congress on the Chemistry of Cement, Madrid (Spain), 3rd-8th July 2011.

- *Interaction between Cement and Anti-Graffiti Coating: Surface Energy and Acid-Base Constant* (Oral contribution), [P. Carmona-Quiroga](#), J. Rubio, S. Martinez-Ramirez, M.T. Blanco-Varela.

- *Effect of Temperature on the Composition and Structure of C-S-H Gel Obtained by Hydrating C₃S* (Oral contribution), I.F. Saez del Bosque, M. Martin Pastor, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela.
- *Thermodynamic Stability of Hydrated Portland Cement Phases in the Presence of Barium Carbonates* (Oral contribution), P. Carmona-Quiroga, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela.
- *Thermal Behaviour of Thaumasite* (Oral contribution), M.T. Blanco-Varela, F. Rubio, M.A. García-Aranda, M.A. de la Torre, S. Martínez-Ramírez.
- *Evolution to Carbonates Compounds of Phases Developed on Ternary Systems Materials* (Oral contribution), L. Fernández, D. Torrens, L.M. Morales, S. Martínez-Ramírez.

1st International ARIEL Science Workshop, Vancouver (Canada), 5th-11th July 2011.

- *ISOLDE and the Way to High RIB Intensities and Energies* (Invited talk), O. Tengblad.

5th International Conference on Neutron Scattering (ECNS 2011), Prague (Czech Republic), 17th-22th July 2011.

- *InStructure of Deuterated Liquid n-Butanol by Neutron Diffraction* (Oral contribution), L. Onandia-Fernández, G. J. Cuello, V. Cristiglio, M. A. González, C. Cabrillo.
- *Temperature-Programmed Isochoric Desorption (TIDES): Adding Value to Neutron-Scattering Studies on Nanoporous Materials* (Poster), M. Krzystyniak, A. Lovell, N. T. Skipper, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, F. Fernández-Alonso.

Rutherford Centennial Conference, Manchester (United Kingdom), 8th-12th August 2011.

- *Scattering of the Halo Nucleus ¹¹Li and its Core ⁹Li on ²⁰⁸Pb at Energies around the Coulomb Barrier*(Oral contribution) M.J.G. Borge
- *Excited States in ⁷⁹Zn and the N=50 Shell Gap* (Oral contribution) R. Orlandi.

18th Euroschool on Exotic Beams, Jyväskylä (Finland), 20th-26th August 2011.

- *Fast Phoswich Scintillator Detector* (Poster -Third prize-), J. Sánchez del Río, J.A. Briz, M. Carmona, E. Nacher, O. Tengblad and M.J.G. Borge.
- *Measurement of Magnetic Moments in ^{72,74}Zn by Means of Transient Field Technique* (Oral contribution and Poster), A. Illana.

14th European Congress on the Spectroscopy of Biological Molecules, Coimbra (Portugal), 29 August- 3 September.

- *Plasmonics Helps Spectroscopy to Understand Biomolecules* (Invited talk), S. Sanchez-Cortes.

6th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archeology, Parma (Italy), 5th-8th September 2011.

- *Micro-Raman and Surface-Enhanced Raman Scattering Analysis of Pigments in Ancient Islamic Manuscripts of Meknes(Morocco)* (Oral Contribution) S. Sanchez-Cortes, S. Ait Lyazidi, M. Haddad, A. El Bakkali, E. del Puerto.
- *Study of a 3rd Generation Commercial Cement Superplasticizer by Spectroscopic Techniques: UV-Visible, Raman and SERS* (Poster) M.V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, S. Martínez-Ramírez.

EUROMAT 2011, Montpellier (France), 12th-15th September 2011.

- *Fluorescence Detection of the Anti-Tumoral Drug Emodin Adsorbed on Silver Nanoparticles and Loaded in Nanostructured Porous Silicon* (Poster), M. Hernández, P. Sevilla, G. Recio, C. Domingo, M. Manso-Silvan, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos.

(Conjunta con FM)

- *New Strategies for Employing Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) in the Detection of High Performance Synthetic Organic Pigments: Quinacridones* (Oral contribution), C. Domingo, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con FM)

- *SER(R)S and SEF Characterization of N-N'-Dialkylquinacridones Used as Co-Dopants in High Performance Organic Light-Emitting Devices (OLEDs)* (Poster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con FM)

- *Study of the Interactions Emodin-Bovine Serum Albumin-Silver Nanoparticles on a Colloidal System* (Poster), P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con FM)

XX Colloque de GANIL, Beldodère (France), 25th-30th September 2011.

- *Scattering of ¹¹Li and its Core ⁹Li at Energies near the Coulomb Barrier* (Invited talk), M^a José García Borge.

SERS Roundtable 2011, Poltersdorf (Germany), 27th-29th September 2011.

- *New Approaches for the SERS Detection of Sport-Doping Substances, Pesticides and Synthetic Organic Pigments* (Oral contribution), C. Domingo, E.del Puerto, I. Izquierdo, L. Roldan, P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
(Conjunta con FM)

R-ECFA Committee, Madrid (Spain), 7th October 2011.

- *Nuclear Physics in Spain* (Invited talk), M^a José García Borge.

Autumn Workshop on GEANT4 Simulations in Low-Energy Nuclear Physics, Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences ((Slovak Republic), 9th -12th October 2011.

- *Geant4 Simulations Applied to the Solution of Practical Inverse Problems: The Cases of TAS and PE* (Oral contribution), E. Nacher, J. Sánchez del Rio.

METAMATERIALS 2011, Barcelona (Spain), 10th-14th October 2011.

- *Tailoring Plasmon Resonances for Applications in Nanophotonics* (Poster), R. Rodríguez-Oliveros, F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, D. Macías, J. A. Sánchez-Gil.
- *On the Homogenization Problem by Means of Surface Integral Equations* (Poster), R. Paniagua-Domínguez, J. A. Sánchez-Gil, M. Silveirinha.

Workshop on Analysis of Diffraction Data in Real Space (ADD2011), Grenoble (France), 12th-14th October 2011.

- *Real Space Theory of Scattering from Paracrystals* (Oral contribution), C. Cabrillo.

2011 S393/land02 Workshop, GSI, Darmstadt (Germany), 3rd-4th November 2011.

- *Studies of an Improved Adback Algorithm for the Crystal Ball* (Oral contribution), G. Ribeiro

6th DITANET Topical Workshop on Particle Detection Techniques, Seville (Spain), 7-8th November 2011.

- *The Gamma Proton Calorimeter for R3B* (Invited talk), O. Tengblad.

First School on Experiment Techniques with radioactive beams of Radioactive beams, Catania (Italy), 7th-11th of November 2011.

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

11th International Conference on Laser Ablation (COLA-2011), Playa Del Carmen (Mexico), 13th-19th November 2011.

- *Infrared Laser Induced Breakdown Spectroscopy of DNA bases Guanine and Adenine* (Poster), L. Diaz Sol, L. Rubio, J. J. Camacho.
- *Wavelength Dependence of Si Nanocrystal Phase Separation in the Ablation of Bulk SiO Targets* (Poster), M. Martin, M. Jadraque, L. Diaz Sol, A.B. Evtushenko, Y.G. Shukhov, A.V. Bulgakov.

Trends in Nanotechnology 2011 (TNT11), Tenerife (Spain), 21st-25th November 2011.

- *Higher-Order Resonances in Single-Arm Nanoantennas: Evidence of Fano-like Interference* (Oral contribution), F. López-Tejeira, R. Paniagua-Domínguez, R. Rodríguez-Oliveros, J. A. Sánchez-Gil.

ISOLDE Workshop, Geneve (Switzerland), 4th-7th December 2011.

- *Reaction Experiments Induced by Light Exotic Nuclei at REX-ISOLDE* (Invited talk), O. Tengblad.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

International School and Conference on Quantum Information Processing and Applications, Allahabad, India, 14-20th Feb 2011

- *Quantum Information Processing in Optical Lattices* (Invited lecture), M. Rodríguez
- *Tunable Particle Current without Breaking the Time-Reversal Symmetry* (Invited lecture), M. Rodríguez

European Geosciences Union (EGU), Vienna, (Austria), 3-8th of April 2011.

- *Anomalies in the Spectra of Planetary Ice Particles* (Oral Communication), R. Escribano, O. Gálvez, B. Maté, M.A. Moreno, V.J. Herrero.
- *Quantum Chemical Investigation on the Catalytic Mechanism of Vanadium Iodoperoxidase and the Iodination of Common Organic Compounds*, (Poster), O. Gálvez, L.F. Pacios.

IX Workshop on Frontiers in Low Temperature Plasma Diagnostics (FLTPD2011), Zinnowitz (Germany), 9-12th of May 2011.

- *Neutral and Ion Chemistry in Low Pressure Plasmas of H₂/N₂ Mixtures* (Poster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V.J. Herrero, I. Tanarro.

XXIVth International Symposium on Molecular Beams. ISMB XXIV, Bordeaux, (France), 23-26th of May 2011.

- *Photodissociation of Pyrrole-Ammonia Clusters by Velocity Map Imaging: Mechanism for the H-Atom Transferreaction* (comunicación oral), L. Rubio-Lago, G. A. Amaral, A. N. Oldani, J. D. Rodríguez, M. G. González, G. A. Pino, L. Bañares.

The Molecular Universe, International Astrophysical Union Symposium 280, Toledo(Spain), 30th of May -3rd of June 2011.

- *Ammonium and Formate Ions in Interstellar Ice Analogues. Ice Morphology and the Elusive 6.85 μ m Band* (Poster), V.J. Herrero, B. Maté, O. Gálvez, D. Fernández-Torre, M.A. Moreno, R. Escribano.
- *An Infrared Study of Glycine in Astrophysical Ices* (Poster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, I. Tanarro, R. Escribano.
- *Infrared Spectroscopy of D₂O in Amorphous and Crystalline Water Environments* (Poster), O. Gálvez, B. Maté, R. Escribano, V.J. Herrero.

6th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS6), Sonoma, CA, (USA), 12-17th of June 2011.

- *New Approaches for Employing Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) in the Detection of Quinacridone Derivatives*(Poster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-- Ramos.
(Conjunta con ENVYMED)
- *SER(R)S and SEF Characterization of N-N'-Dialkylquinacridones Used as Co-Dopants in High Performance Organic Light-Emitting Devices (OLEDs)* (Poster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
(Conjunta con ENVYMED)
- *Surface-Enhanced Raman Scattering of Cucurbit[n]urils (N=6-8) and Its Complexes with Viologens* (Poster), M.L. Roldán, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo.
(Conjunta con ENVYMED)
- *Solubilisation of the Anti-Inflammatory Drug Piroxicam on Silver and Gold Colloids: a SERS Study* (Poster), P. Sevilla, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.
(Conjunta con ENVYMED)

11th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (11th IBER), Coimbra (Portugal), 19-22th of June 2011.

- *A Quasiclassical Interpretation of the Extreme Kinetic Isotope Effect Observed in the Muonic Variants of the H+H₂ Reaction* (Poster), P.G. Jambrina, E. García, V.J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, F.J. Aoiz.
- *Kinetics of Neutrals and Ions in Cold Plasmas of H₂, H₂/D₂ and H₂/N₂ Mixtures* (Invited conference), I. Tanarro, V.J. Herrero, E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo.
- *IR Spectroscopic Study of Glycine in Icy Environments of Astrophysical Relevance* (Poster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, I. Tanarro, R. Escribano.

Quantum Transport in Dilute Gases: Benasque, Huesca, 4-15th July (2011).

- *Quantum Dynamics: From Ultracold Atomic Gases to Photosynthetic Complexes* (Oral contribution), M. Rodríguez, J. Santos

Matrix 2011, Vancouver (Canada), 10-15th of July 2011.

- *Infrared Study of Solid Glycine in Environments of Astrophysical Relevance* (Invited talk and Poster), B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, O. Gálvez, I. Tanarro, R. Escribano.
- *Spectroscopic Observation of Matrix-Isolated Carbonic Acid Trapped from the Gas Phase* (Poster), J. Bernard, M. Seidl, T. Loerting, I. Kohl, K. R. Liedl, E. Mayer, O. Gálvez, H. Grothe.

Watoc 2011, Santiago de Compostela, (Spain), 17-22th of July 2011.

- *Proton Transfer and Autoionization in HNO₃.HCl.(H₂O)_n Particles* (Poster), F.M. Balci, N. Uras-Aytemiz, P.C. Gómez, R. Escribano.

Quantum Effects in Biological Systems (QUEBS 2011), Ulm University, Germany, 1-5th Aug 2011.

- *Efficiency of Excitonic Energy Transfer and Trapping in Photosynthetic Systems, 2D Spectroscopy of the Fenna- Matthew-Olson Complex* (Poster), K. Kreisbeck, T. Kramer, M. Rodríguez, B. Hein

International Conference on Processes of Ionized Gases, ICPIG 2011, Belfast, (UK), 28th of August – 2nd of September 2011.

- *Chemistry in Glow Discharges of H₂ and N₂ Mixtures. Diagnostics and Modelling* (Poster), E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, V.J. Herrero and I. Tamarro.

22nd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Dijon, (France), 29th of August– 2nd of September, 2011.

- *High Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the ν_5 (C-H) Stretching Mode of C₂H₄* (Poster), H. Aouididi, M. Rotger, R. Z. Martínez, D. Bermejo, V. Boudon.
- *High Resolution Infrared and Raman Spectroscopy of ν_2 and Associated Combination and Hot Bands of ¹³C¹²CD₂*. (Poster) G. di Lonardo, L. Fusina, A. Baldan, D. Bermejo, R. Z. Martínez.

XII International Symposium and XXII National Congress on Solid State Dosimetry, Ciudad de México, (México), 5-9th of September, 2011.

- *Thermoluminescence Response of Gamma-Irradiated Sesame with Mineral Dust* (Poster). Y. Rodríguez-Lazcano, V. Correcher, J. Garcia-Guinea, E. Cruz-Zaragoza,

EUROMAT 2011, Montpellier (Francia), 12-15th of September 2011.

- *Fluorescence Detection of the Anti-Tumoral Drug Emodin Adsorbed on Silver Nanoparticles and Loaded in Nanostructured Porous Silicon* (Poster), M. Hernández, P. Sevilla, G. Recio, C. Domingo, M. Manso-Silvan, R.J. Martín-Palma, J.V. García-Ramos.

(Conjunta con ENVYMED)

- *New Strategies for Employing Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) in the Detection of High Performance Synthetic Organic Pigments: Quinacridones* (Oral Communication), C. Domingo, E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con ENVYMED)

- *SER(R)S and SEF Characterization of N-N'-Dialkylquinacridones used as Co-Dopants in High Performance Organic Light-Emitting Devices (OLEDs)* (Poster), E. del Puerto, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con ENVYMED)

- *Study of the Interactions Emodin-Bovine Serum Albumin-Silver Nanoparticles on a Colloidal system* (Poster), P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con ENVYMED)

SERS Roundtable 2011, Poltersdorf (Germany), 27-29th of September 2011.

- *New Approaches for the SERS Detection of Sport-Doping Substances, Pesticides and Synthetic Organic pigments* (Oral Communication), C. Domingo, E. del Puerto, I. Izquierdo, L. Roldan, P. Sevilla, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos.

(Conjunta con ENVYMED)

11th International Conference on Laser Ablation COLA2011, Playa del Carmen, (México) 13-19th of November 2011.

- *Femtosecond Pulsed Laser Deposition of Wide Bandgap Semiconductors: Wavelength Effects and Applications in Mass Spectrometric Analysis* (poster), M. Sanz, M. E. López-Arias, R. de Nalda, B. Martínez-Haya, J. G. Izquierdo, L. Bañares, M. Castillejo.

American Geophysical Union (AGU), San Francisco (USA), 5-9th of December 2011.

- *Deuterium in Astrophysical Ice Analogues: Isotope Exchange and IR Detection Sensitivity* (Poster), R. Escribano, O. Gálvez, B. Maté, V. J. Herrero.
- *A Comparison of Specific Surface Area and Crystallization Kinetics in Compact and Porous Amorphous Solid Water* (Poster), V.J. Herrero, Y. Rodríguez-Lazcano, B. Maté, O. Gálvez, R. M. Escribano.

4.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

HASYLAB Users' Meeting 2011, Satellite Meeting 'Status and Perspectives of Small Angle X-ray Scattering at DESY', Hamburg (Germany), 27th of January 2011.

- *Nanostructure and Crystallization Phenomena in Multilayered Films of Alternating Semicrystalline Polymers as Revealed by SAXS and WAXS* (Invited lecture), Francisco J. Baltá-Calleja, Fernando Ania.
- *Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Polymeric Thin Films as Characterized by GISAXS* (Invited lecture), T. Ezquerro.

POLYCHAR 19, World Forum on Advanced Materials, Nepal Polymer Institute, Kathmandu (Nepal), 20-24th of March 2011.

- *New Insights on The Crystallization Process of Polyethylene using Molecular Dynamics* (Oral contribution), J. Martínez-Salazar, S. San Martín, J. Ramos.
- *Nanostructure and Crystal Orientation in Different Multilayered Films* (Oral contribution), Fernando Ania, A. Flores, C. Arribas, F.J. Baltá Calleja.
- *From the Glassy State to Ordered Polymer Structures: A Microhardness Study* (Invited lecture), Araceli Flores, F. Ania, F.J. Baltá Calleja.
- *Effect of Branching in Molecular Dimensions, Entanglement Features and Linear Rheology of Ethylene/1-Hexene Copolymers* (Oral contribution), J.F. Vega, J. Ramos, J. Martínez-Salazar.
- *Structure Analysis of The Transmembrane Cannabinoid CB1/CB2 Receptors in a Solvated Lipid Bilayer by Molecular Dynamics Simulations* (Oral contribution), J. Ramos, V.L. Cruz, J. Martínez-Salazar.

5th Iberian Grid Infrastructure Conference, Santander (Spain), 8th-10th of June 2011.

- *Merging on Demand HPC Resources from Amazon EC2 with the Grid: A Case Study of a XIMPP Application* (Oral contribution), A. Lorca, J. Martín-Caro, R. Nuñez-Ramírez, J. Martínez-Salazar.

XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid, 22-30th of August 2011.

- *X-ray Scattering as a Tool for the Study of Finite Size Effects in Polymers* (Poster), A. Flores Aguilar-Amat.
- (Chair of keynote lecture), A. Flores Aguilar-Amat.

GISAXS 2011, Hamburg (Germany), 10-12th of October 2011.

- *Application of GISAXS to the Assessment of Nanostructured Polymer Surfaces* (Invited lecture), T.A. Ezquerro.

Small Angle X-Ray Scattering Beamline P62 at the PETRA III Extension: Second User Workshop, Hamburg (Germany), 13th and 14th of October 2011.

- *Study of the Nanostructure and Crystallization Phenomena in Nanolayered Polymers Using USAXS and SAXS* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja.

International Conference on Polymers and Advanced Materials «POLYMAT 2011», Huatulco (Mexico), 16-21st of October 2011.

- *Entanglement Features and Molecular Dynamics of Linear and Short Chain Branched Polyolefins : Full Atomistic Computer Simulations and Experiments* (Invited lecture), J. Martínez-Salazar, J. Ramos and J.F. Vega.

IUPAC 7th International Conference on Novel Materials and Synthesis (NMS-VII) and 21st International Symposium on Fine and Functional Polymers (FCFP-XXI), Shanghai (China), 16-21st of October 2011.

- *Nanostructured Periodic Surfaces on Polymer Thin Films: Preparation and Properties* (Invited lecture), T.A. Ezquerro.

BIT's 1st Annual World Congress of Nano-S&T. Theme: A Dedicated Events for Nanoscience and Nanotechnology Professionals, Dalian (China), 23-26th of October 2011.

- *Laser Induced Periodic Surface Structures (LIPSS) on Polymeric Thin Films* (Invited lecture), T.A. Ezquerro.

18th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels (Belgium), 20th and 21st of October 2011.

- (Participation as CSIC Expert), M.C. García-Gutiérrez.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Dr. Ulrich Spherhake**, IEEC-CSIC, Barcelona, Spain, 13th of January 2011.
- ❖ **Prof. Madhavan Varadarajan**, Raman Research Institute, Bangalore, India, 22th May-3rd June 2011.
- ❖ **Prof. Anton Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 30th of May-13th of June 2011.
- ❖ **Dr. Mitko Gaidarov**, Bulgarian Academy of Sciences, 6th-19th of June 2011.
- ❖ **Dr. Tomasz Pawlowski**, University of New Brunswick, Fredericton, Canada, 7th -15th of June 2011.
- ❖ **Dra. María Villa Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana, Mexico, 3rd-15th of September 2011.
- ❖ **Dr. Alexander López**, University of Regensburg, Germany, 19th-28th of September 2011.
- ❖ **Prof. Gustavo E. Scuseria**, Rice University, USA, 9th-13th of November 2011.
- ❖ **Dr. Thiago Pereira**, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Brasil, 27th of November-1st of December 2011.

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

- ❖ **Dra. Lorena Roldán**, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, Argentina, 1st January- 31st December 2011.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Université Paris XIII, Paris, France, 21st-22nd February; 20th-21st December 2011.
- ❖ **Dr. Gabriela Fabriciova**, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 30th May-5th June 2011.
- ❖ **Dr. Diana Fedunova**, Institute of Experimental Physics, Academy of Sciences, Slovak Republic, 30th May- 5th June.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 5th-10th June 2011.
- ❖ **Prof. Eugenio R. Méndez**, Departamento de Óptica, División de Física Aplicada (CICESE), Ensenada Mexico, 11th-18th July 2011.
- ❖ **Prof. Kenji Hara**, Institute of Catalysis, Hokkaido University, Sapporo, Japan, 20th-27th July 2011.
- ❖ **Prof. Alessandro Feiss**, University of Florence, Italy, 1st September-31st December 2011.
- ❖ **Věra Jandová**, Laboratory of Laser Chemistry, Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic, 14th of September-14th December 2011.
- ❖ **Jana Kubackova**, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, 1st October- 31st December 2011.
- ❖ **Prof. Saadia Ait Lyazidi**, LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Morocco, 10-19th December 2011.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

- ❖ **Dr. Birgit Hein**, University of Regensburg, Germany, 24th-30th Oct 2011.
- ❖ **Pr. Tobias Kramer**, University of Regensburg, Germany, 24th-30th Oct 2011.
- ❖ **Dr. Christoph Kreisbeck**, University of Regensburg, Germany, 24th-30th Oct 2011.
- ❖ **Matthias Kühnel**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 2nd Nov-21st Dec 2011.
- ❖ **Prof. Robert E. Grisenti**, J. W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 12th-17th Dec 2011.

4.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

- ❖ **Leila Latréche**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 2nd-28th February 2011.
- ❖ **Dr. Emilio Rayón Encinas**, Instituto de Tecnología de Materiales, Univ. Politécnica de Valencia, 7th-11th March 2011.
- ❖ **Dr. Said Bouhelal**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 17th-26th March 2011 and 6th-20th September 2011.
- ❖ **Souhila Khellaf**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 22nd March- 2nd April 2011.
- ❖ **Prof. H.H. Kausch-B. von Schmeling**, Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL), Lausanne, 9th-13th April 2011.
- ❖ **Prof. Benachour**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 17th-27th April; 1st-7th July 2011 and 13th October-4th November 2011.

- ❖ **Yudith da Silva Caires**, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 28th April-16th September 2011.
- ❖ **Grisel Zapino Guzmán**, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 28th April-16th September 2011.
- ❖ **Prof. G.H. Michler**, Institut für Physik, Martin-Luther-Universität, Halle, 21st-28th May 2011.
- ❖ **Prof. Z. Roslaniec, Ms. Sandra Simzic**, Poland, 8th May 2011.
- ❖ **Prof. Marcelo A. Villar**, Universidad Nacional del Sur y CONICET, Bahía Blanca, Argentina, 20th-24th June 2011.
- ❖ **Adriana Jarjour Pinto**, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 25th July-22th December 2011.
- ❖ **Nathalie Jarjour Pinto**, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 25th July-22th December 2011.
- ❖ **Karina Jerónimo Martínez**, Universidad Simón Bolívar, Caracas, Venezuela, 25th July-22th December 2011.
- ❖ **Dr. Florian Spieckermann**, Universidad de Viena, Austria, 5th-9th September 2011.
- ❖ **Foued Zouai**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 6th-20th September 2011.
- ❖ **Samira Chaibi**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 13th October-4th November 2011.
- ❖ **Samia Boufassa**, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 3rd-22nd Decembre 2011.
- ❖ **Abdelhak Hellati**, Centre Universitaire Bordj Bou Arreridj (BBA), Algeria, 3rd-22nd Decembre 2011.

4.4. CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED CONFERENCES

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

Dr. Ulrich Sperhake.

Department of Physics and Astronomy, IEEC-CSIC, Barcelona.
Colliding Black Holes in 3+1 and Higher Dimensions.
 13th January 2011.

Prof. Antonio López Maroto.

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid.
On the Electromagnetic Nature of Dark Energy and the Origin of Cosmic Magnetic Fields.
 10th February 2011.

Prof. Francisco Guinea López

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid.
Graphene and Its Unique Properties.
 16th February 2011.

Dr. Alexander López

University of Regensburg (Germany).
Transport Properties of Gaussian Electronic States in Grapheme under Time-Periodic Rashba Spin-Orbit Coupling.
 28th September 2011.

Prof. Gustavo E. Scuseria

Rice University (USA).
Symmetry Breaking and Restoration.
 11th November 2011.

Dr. Thiago Pereira.

Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Brazil.
The Statistical Concordance Model of CMB.
 30th November 2011.

International Loop Quantum Gravity Seminars:

(By phone conference, together with 13 other international centers).

Dr. Gianluca Calcagni

Albert Einstein Institute, Postdam, Germany.
Inflationary Observables and Observational Constraints in LQC.
 18th January 2011.

Dr. Francesca Vidotto.

Université de Marseille, Marseille France.

Spinfoam Cosmology.

1stFebruary 2011.

Dr. Tomasz Pawłowski.

University of New Brunswick, Fredericton, Canada.

Semiclassicality of the Loop Quantum Universe.

15thFebruary 2011.

Prof. Laurent Freidel.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

The Principle of Relative Locality.

1stMarch 2011.

Dr. Winston Fairbairn.

Hamburg University, Hamburg, Germany.

Quantum Deformation of 4d Spin Foam Models.

15thMarch 2011.

Dr. Iván Agulló.

PennState University, State College (PA), USA.

Observational Signatures in LQC.

29thMarch 2011.

Dr. James Ryan.

Albert Einstein Institute, Postdam, Germany.

Simplicity Constraints and the Role of the Immirzi Parameter in Quantum Gravity.

12thApril 2011.

Razvan Gurau.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

The 1/N Expansion in Colored Tensor Models

26thApril 2011.

Prof. Daniele Oriti.

Albert Einstein Institute, Postdam, Germany.

Quantum Geometry in the Group Field Theory Formalism.

10thMay 2011.

Jacek Puchta.

University of Warsaw, Warsaw, Poland.

The Feynmann Diagramatics for the Spin Foam Models.

20thSeptember 2011.

Norbert Bodendorfer/Andreas Thurn.

University of Erlangen, Erlangen, Germany.

New Variables in Arbitrary Dimensions.

4thOctober 2011.

Dr. William Nelson.

PennState University, State College (PA), USA.

Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology.

18thOctober 2011.

Dr. Tim Kosłowski.

Perimeter Institute, Waterloo, Canada.

Shape Dynamics.

1stNovember 2011.

Prof. Jonathan Engle.

Florida Atlantic University, Boca Raton (FL), USA.

Plebanski Sectors of the New Spin Foam Models.
15th November 2011.

Dr. Philipp Hoehn.

University of Utrecht, Utrecht, the Netherlands.
A Canonical Formalism for Simplicial Gravity.
29th November 2011.

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

Prof. Björn Jonson

Chalmers University of Technology (Sweden).
NUSTAR and Status of the FAIR and R3B Project.
12nd January 2011.

Dr. José Javier Valiente Dobon.

Laboratori Nazionali di Legnaro, Padova (Italy).
Spectroscopic Studies of Neutron-Rich Nuclei with the CLARA-PRISMA Setup and the Initial Physics Campaign with the AGATA Demonstrator at LNL.
24th February 2011.

Dr. Augusto O. Macchiavelli.

Nuclear Science Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley (USA).
Selected Topics in the Structure of Exotic Nuclei.
25th February 2011.

Prof. Sebastian Schlucker.

University of Osnabrück (Germany).
Raman Spectroscopy and Molecular Recognition: From Artificial Peptide Receptors to the Selective Localization of Proteins in Nanodiagnosics.
17th March 2011.

Dr. Gabriel Martínez Pinedo.

GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung (Germany).
Explosive Nucleosynthesis in Heavy Elements.
29th April 2011.

Dr Martín Alcorta.

Argonne national Laboratory, Illinois (USA).
Fusion Reactions with the Halo Nucleus ¹³C.
13th May 2011.

Prof. Pavol Miskovsky.

University P. J. Safarik of Kosice (Slovak Republic).
Development of Selective Nano-Delivery System and Detection of Therapeutically Active Form of Drugs in Cell - (Nano) Biophotonics Approach.
8th June 2011.

Dr. Miguel Madurga.

Oak Ridge National Lab, Knoxville (USA).
Desintegración beta en la region de ⁷⁸Ni: Resumen de los últimos resultados obtenidos en HRBIF/ORNL.
14th June 2011.

Dr. Carlos Granja.

Institute of Experimental and applied Physics, Czech Technical University, Prague (Czech Republic).
Nuclear Physics with the Pixel Detector Timepix.
21st October 2011.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Prof. Sebastian Schlücker.

Universität Osnabrück (Germany).

Raman Spectroscopy and Molecular Recognition: From Artificial Peptide Receptors to the Selective Localization of Proteins in Nanodiagnosics.

17th March 2011.

(Together with ENVYMED)

4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Prof. H.H. Kausch-B. von Schmeling.

Swiss Federal Institute of Technology Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland, 9-13th of April 2011.

80 Years of Macromolecular Science: From Its Birth to Nano-, Bio-, and/or Self-Assembling Polymers – with Emphasis on European Contributions.

11th of April 2011.

Dr. Emilio Rayón Encinas

Instituto de Tecnología de Materiales, Universidad Politécnica de Valencia, Spain.

Fundamentos de la Técnica de Nanoindentación.

10th of March 2011.

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS

(De una semana o más / Longer than one week)

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

Jesús Fernando Barbero González.

- Raman Research Institute, Bangalore, India, 7th-19th of December 2011.

Eduardo Garrido Bellido.

- Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Aarhus, Denmark, 1st – 7th of May 2011, and from 11th - 17th December 2011.
- Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, INFN, Pisa, Italy, 21th - 28th of October 2011.

Guillermo A. Mena Marugán

- Facultad de Ciencias, UNAM, Mexico DF, Mexico, 20th of October-7th of November 2011.

María Luisa Senent Diez

- Université de Le Havre, France, 9th-24th of March 2011.
- Université Paris-Est Marne la Vallée, France, 3rd-9th of March 2011.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- University of Regensburg, Germany, 1st– 31st of May 2011.
- Institute of Physics and Chemistry of Materials of Strasbourg, France, 1st– 26th of June 2011.
- Institute of Physics and Chemistry of Materials of Strasbourg, France, 3rd– 10th of July 2011.

Rayner Rodríguez-Guzmán.

- Institute for Theoretical Physics, University of Tuebingen, Germany 15th-30th of June 2011.

Daniel Martín de Blas.

- Faculdade de Ciências Exactas, Universidade da Beira Interior, Covilhã, Portugal, 15th of September-1st of November 2011.

Javier A. Olmedo Nieto.

- Max Planck Institute for Gravitational Physics, Potsdam, Germany, 20th of June-19th of August 2011.

- Perimeter Institute, Waterloo, Canada, 27th of October-9th of November 2011.

Esther Vicente Torrico.

- Center for Cancer Research, National Institutes of Health (NIH), Bethesda, Maryland (USA), 1st of June-30th of September 2011.

4.5.2 DPTO. DEESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY

Santiago Sánchez Cortés.

- Università di Bologna, Italy, 8th -14th of September 2011.
- Univ. P. J. Safarik, Kosice, Slovakia, 17th-25th of October 2011.
- LASMAR, Université Moulay Ismail, Meknes, Morocco, 15th-23th of November 2011.

Carlos Cabrillo García.

- ISIS at Rutherford Appleton Laboratory (Pulsed Neutron and Muon Source), Chilton, United Kingdom, 26th of July-4th of August 2011; 22th of November-1st of December 2011.

José A. Sánchez Gil.

- Institut Charles Delaunay-Laboratoire de Nanotechnologie et d'Instrumentation Optique, Université de Technologie de Troyes, France, 13th-20th of June 2011.

Ricardo Fernández Perea.

- ISIS at Rutherford Appleton Laboratory (Pulsed Neutron and Muon Source), Chilton, United Kingdom, 26th of July-4th August of 2011.

Riccardo Orlandi.

- CERN, Geneva, Switzerland, 10th-22nd of November 2011.

José Antonio Briz Monago.

- ISOLDE(On-line isotope Mass Separator) at CERN (European Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 15th-22nd of August 2011; 15th of September-15th of November 2011

Mariano Carmona Gallardo.

- TRIUMF, Vancouver (Canada), 1st-15th of September 2011.
- University of York, York (United Kingdom), 21st of September -22nd of December 2011.

Mario Cubero Campos.

- ISOLDE (On-line isotope Mass Separator) at CERN(Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 25th of November-1st of December 2011.

Elena del Puerto Nevado

- University of Osnabrück, Germany, 1st of March- 30th of May 2011.

Andrés Illana Sisón.

- ISOLDE(On-line isotope Mass Separator) at CERN (Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 27th of July-5th of August 2011; 28th of October-4th of November 2011; 10th- 22th of November 2011.

Irene Izquierdo Lorenzo

- Université Claude Bernard Lyon I, Lyon (France), 4th of April-5th of May 2011.

Ramón Paniagua Domínguez.

- Instituto de Telecomunicações, Universidade de Coimbra, Portugal, 31th of January-1st of March 2011.

Vicente Pseudo Fortes.

- ISOLDE(On-line isotope Mass Separator) at CERN (Organization for Nuclear Research), Geneva, Switzerland, 9th-16th September 2011; 23rd-29th of October 2011.

Guillermo Ribeiro Jiménez.

- Subatomic Physics Division, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 24th of January - 4th of February; 1st of September - 30th of November 2011.

4.5.3 DPTO. DEFÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano Torres

- Department of Chemistry, University of British Columbia, Vancouver (Canada), May-October 2011.

Salvador Montero Martín.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 21th-27th of March 2011.

José M. Fernández Sánchez.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 21th-27th of March 2011.

Julio Santos Gómez.

- University of Regensburg, Germany, 20th-27th of May 2011.

Guzmán Tejada Gala.

- Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität Frankfurt-am-Main, Germany, 21th-27th of March 2011.

Mirta Rodríguez Pinilla

- University of Regensburg, Germany 26th of July-4th of August 2011.

4.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Aurora Nogales Ruiz.

- Oxford Rutherford Appleton Laboratory, Oxford, UK, 28th of March-3rd of April 2011.

Víctor Cruz Cañas

- Gestión Proyecto Europeo: Programme Transnational Access Visit of HPC, Groningen, Holland, 19-30th of July 2011.

Alejandro Sanz Parras.

- Oxford Rutherford Appleton Laboratory, Oxford, UK, 28th of March-3rd of April 2011.

Francisco J. Baltá Calleja.

- State University of New York at Stony-Brook, New York and Case Western Reserve University, Cleveland, USA, 3-13th of June 2011.
- DESY/HASYLAB and University of Hamburg, Hamburg, Germany, 30th of June-8th of July 2011.

CAPÍTULO 5
LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA
Y OTRAS ACTIVIDADES

CHAPTER 5
TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES

5.1 DOCENCIA / TEACHING

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

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- Estructura Nuclear - Máster Interuniversitario en Física Nuclear. Universidad Autónoma de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 12 horas.)

Luis J. Garay.

- Relatividad general avanzada y agujeros negros - Máster de Física Fundamental. Universidad Complutense de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 45 horas, 6 créditos --together with Prof. F.J. Chinae.)
- Mecánica Teórica - Licenciatura de CC. Físicas. Universidad Complutense de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 60 horas, 6 créditos.)

Elvira Moya Valgañón.

- Física Nuclear y de Partículas - Quinto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas, Máster en Física Fundamental y Máster Interuniversitario de Física Nuclear, curso 2010/2011 y 2011/2012. Universidad Complutense de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 40 horas.)

Óscar Moreno Díaz

- Física Nuclear y de Partículas – Licenciatura en Física (Troncal 5º curso, grupos B y C) y Máster en Física Fundamental. Universidad Complutense de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 30 horas.)
- Estructura Nuclear – Licenciatura en Física (Optativa 5º curso) y Máster en Física Fundamental. Universidad Complutense de Madrid. (HORAS de docencia IMPARTIDA: 10 horas.)
- Complementos de Física – Máster en Formación del Profesorado de Educación Secundaria y Bachillerato. Universidad Complutense de Madrid (HORAS de docencia IMPARTIDA: 25 horas.)

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

M^a José García Borge.

- Física Nuclear Experimental – Máster Interuniversitario de Física Nuclear- Universidades y Centros del CSIC y CIEMAT. (HORAS de docencia IMPARTIDA: Coordinadora de la asignatura de 6 créditos.)
- Beta-Decay Studies: Peering into Nuclear Structure– First SPES School on Experimental Techniques with Radioactive Beams Instituto Nazionale di Fisica Nucleare- INFN-LNS (HORAS de docencia IMPARTIDA: 4 horas.)

Olof Tengblad

- Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials –Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”.
Universidad Carlos III de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 10 horas /Laboratory Project-CSIC.)
- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Máster Interuniversitario de Física Nuclear.
Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 25 horas.)

Sagrario Martínez Ramírez.

- Química del Cemento – Curso Doctorado-
Universidad Politécnica de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 4 --50 créditos.)

Enrique Nácher González.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Máster Interuniversitario de Física Nuclear.
Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA:25 horas.)

Enrique Nácher González.

- Física Nuclear Experimental–Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”.
Universidad Carlos III de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA:10 horas.)

José Sánchez del Río.

- Física Nuclear Experimental – Máster Interuniversitario de Física Nuclear-
Universidades, Centros del CSIC y CIEMAT.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 5 horas --6 créditos.)

Paz Sevilla Sierra.

- Caracterización y propiedades de fármacos y sistemas afines- Máster en Ciencias Farmacéuticas.Universidad Complutense de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 20 horas.)
- Física Aplicada y Fisicoquímica I, 1er. Curso Licenciatura de Farmacia.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 90 horas.)
- Física Aplicada y Fisicoquímica II, 2º Curso Licenciatura de Farmacia.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 90 horas.)

Riccardo Orlandi.

- F. Física Nuclear Experimental – Máster Interuniversitario de Física Nuclear-
Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA:25 horas.)

José Antonio Briz Monago.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear –Máster Interuniversitario de Física Nuclear.
Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA:20 horas.)

José Antonio Briz Monago.

- Física Nuclear Experimental –Máster Erasmus Mundus “Nuclear Fusion Science and Engineering Physics”.
Universidad Carlos III de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 10 horas.)

Mariano Carmona Gallardo.

- Técnicas Experimentales en Física Nuclear – Máster Interuniversitario de Física Nuclear.
Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 20 horas.)

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Concepción Domingo Maroto

- Física de la Luz y de la Materia–Máster en Fotónica-
Universidad Autónoma de Madrid
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 2 horas.)

José Luis Doménech Martínez.

- Asignatura « Técnicas espectroscópicas e instrumentación ».
Máster Interuniversitario « Láseres y sus aplicaciones en Química”.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 8 horas.)

Raúl Martínez Torres

- Prácticas Curriculares (Licenciatura de C.C. Químicas).
Universidad Complutense de Madrid.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 40 horas.)

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerria Sanz

- Impartir clase: " Laboratory Course on Dielectric Spectroscopy" en el 2nd Laboratory Course on Dielectric Spectroscopy, 31st of May-1st of June 2011.
Universidad de San Sebastián.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 2 horas.)

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Dispersión de rayos X: De los sistemas heterogéneos a las capas delgadas en el Curso de postgrado: “Aplicación de la radiación sincrotrón a la caracterización de materiales” ,19-21st of October 2011.
ICMSE-CSIC, Universidad de Sevilla.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 1 hora.)

Juan Francisco Vega Borrego

Experimentos, teorías y simulación por ordenador aplicados a la reología: efecto de las ramificaciones en poliolefinas en el Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, 11th of March 2011.
Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
(HORAS de docencia IMPARTIDA: 2 horas.)

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS /COURSES AND CONFERENCES

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

José González Carmona

- *Higgs-like Condensation of Ripples and Buckling Transition in Graphene*, Lorentz Institute, Leiden (Holland), 7th of July 2011.

Jorge Dukelsky Bercovich

- *Integrable Pairing Models with p-Wave Symmetry*, University of Padua, Italy. 22nd of March 2011.
- *Modelos integrables de Richardson-Gaudin en física mesoscópica*. Universidad Nacional de la Plata, Argentina. 23rd of August 2011.

Jesús Fernando Barbero González

- *Black Hole Entropy and the Thermodynamic Limit*, Centre de Physique Théorique de Luminy, Marsella (Francia), 29th of September 2011.
- *Black Hole Combinatorics and the Thermodynamic Limit*, Raman Research Institute, Bangalore (India), 9th of December 2011.

Eduardo Garrido Bellido

- *Física nuclear: la búsqueda de los límites*, Curso de Verano: 100 Años de Física del Núcleo Atómico. Del átomo de Rutherford al LHC, Universidad de Salamanca, Salamanca (Spain), 21st of June 2011.
- *The ⁸Be and ¹²C Structure and the Triple-Alpha Reaction Rate*, INFN, Pisa (Italy), 26th of October 2011.

Guillermo A. Mena Marugán

- *Cosmología Cuántica de Lazos*, Facultad de C.C. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 17th of February 2011.
- *Unicidad de la cuantización de campos en escenarios no estacionarios*, Facultad de C.C. Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 17th of June 2011.
- *Uniqueness of Quantum Field Theory in Nonstationary Spacetimes*, CINVESTAV, Mexico DF, Mexico, 24th of October 2011.
- *Loop Quantum Cosmology*, Seminario Manuel Sandoval Vallarta, Instituto de Física, UNAM, Mexico DF, Mexico, 28th of October 2011.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- *Tunable Particle Currents in Time-Periodic Potentials*, University of Regensburg, Germany, 23rd of May 2011.
- *Tunable Particle Currents in Time-Periodic Potentials*, Institute of Physics and Chemistry of Materials of Strasbourg, France, 7th of June 2011.

Elvira Moya de Guerra

- *El futuro de la Física Nuclear*. Curso de Verano: 100 Años de Física del Núcleo Atómico. Del átomo de Rutherford al LHC, Universidad de Salamanca, Salamanca (Spain), 21st of June 2011.

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

Santiago Sánchez Cortés

- *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS)*, IEM (CSIC), 1st of July 2011.

M^a José García Borge

- *Beta-Delayed Particle Emission: Peering into Nuclear Structure*(Invited lecturer, 4h), INFN-LNS Catania (Italy), 7th-11th of November 2011.

Carlos Cabrillo García

- *A Novel Numerically Efficient Real Space Theory of Scattering from Paracrystalline Systems: Application to the Diffraction from Colloidal Crystals*, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, 19th of December 2011.

Sagrario Martínez Ramírez

- *Diseño de nuevos morteros de cal. Avances en I+D*, Escuela de Minas, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid (Spain), 28th of April 2011.
- *Caracterización de morteros históricos*, Universidad Complutense de Madrid, 18th of May 2011.
- *Análisis de morteros históricos y puesta en obra de morteros de restauración*, Universidad Complutense de Madrid, 27th of May 2011.
- *Raman Spectroscopy and Its Application to Cement Phases II*, IEM (CSIC), 1st of July 2011.

Enrique Nácher González

- *Geant4 Simulations Applied to the Solution of Practical Inverse Problems: The Cases of TAS and PE*, – Autum Workshop on Geant4 2011 – Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Bratislava (Slovak Republic), 9th -12th October 2011.

María Vega Cañamares Arribas

- *Infrared and Raman Spectroscopy: Application to Cementitious Systems*, IEM (CSIC), 1st of July 2011.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza

- *Stimulated Raman. A Tool for High Resolution Raman Spectroscopy*, Università di Bologna, Bologna, Italy. 11th of May, 2011.

Concepción Domingo Maroto

- *Nanosensores moleculares basados en espectroscopias ópticas intensificadas por nanoestructuras metálicas: SERS (Surface-Enhanced Raman Scattering) y SEF (Surface-Enhanced Fluorescence)*, Workshop, Fotónica en la Comunidad de Madrid, UAM, 18th of May 2011.
- *Infrared Spectroscopy: Fundamentals*, One-day Specialization Course pre Congress on “Infrared and Raman Spectroscopy: Application to Cementitious Systems”, Madrid, 1st of July 2011.
- *Espectroscopía Raman en la Conservación del Patrimonio Histórico-Artístico*, Summer School of the Universidad Complutense de Madrid on “Espectroscopía Raman: Ciencia del futuro para el presente”, El Escorial (Madrid), 12th of July 2011.

Rafael Escribano Torres

- *Spectroscopy of Molecular Astrophysical Models: From Water to Glycine*, Department of Chemistry, University of British Columbia, Vancouver (Canada), 13th of October 2011.

Mirta Rodríguez Pinilla

- *Quantum Transport in Light-Harvesting Complexes and Ultracold Atoms*, ICMAT-CSIC, 10th of March 2011.
- *Dinámica cuántica: de gases ultrafríos a light-harvesting complexes*, IEM-CSIC, Madrid 31th of May 2011.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Fernando Ania García

- *Variación de la nanoestructura en películas delgadas multilaminares*, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP, CSIC), Madrid, 7th of June 2011.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO / COURSES, CONGRESSES AND SEMINARS ORGANIZED BY THE INSTITUTE

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

José González Carmona

- *El grafeno como sistema electrónico en $D = 2$* , part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15th of April 2011.

Jesús Fernando Barbero González, Guillermo A. Mena Marugán, Luis J. Garay Elizondo, Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor, Mikel Fernández Méndez, Daniel Martín de Blas and Javier Olmedo Nieto.

- *LOOPS 11-Madrid (International conference on Quantum Gravity)*, Local Organizing Committee, Campus Central del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, CSIC, 23rd-28th of May 2011.

Jesús Fernando Barbero González

- *Relatividad especial sin coordenadas*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 21st of February 2011.
- *Relatividad General Cuántica*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15th of April 2011.

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

M^a José García Borge.

- *Workshop on Reactions of Astrophysical Interest (EUROGENESIS)*, Madrid, 27th -29th of April 2011.

Olof Tengblad.

- *MAGISOL: Madrid-Arhus-Göteborg International collaboration Meeting*, Madrid, 12th -13th of January 2011.

Carlos Cabrillo García.

- *La Física de la Materia desordenada*, “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 14th of April 2011.

Pedro Carmona Hernández

- *Aplicaciones biológicas de la espectroscopia vibracional*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th -15th of April 2011.

Luis Díaz Sol.

- *Espectroscopia de Plasmas de Ablación y Fotodeposición* part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th of April 2011.

Sagrario Martínez Ramírez.

- *Infrared and Raman Spectroscopy: Application to Cementitious Systems*, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 1st July 2011.

Enrique Nácher González.

- Participation in the “VIII Curso de Introducción a la Investigación 2011”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 14th of April 2011.

María Vega Cañamares Arribas

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th-15th of April 2011.

José Sánchez del Río.

- *Un nuevo calorímetro en R3B para FAIR*, Instituto Nacional de Microelectrónica de Madrid (IMM-CNM-CSIC), Madrid, 29th June 2011.

Fernando López-Tejeira.

- *Nanofotónica y Metamateriales en el IEM*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 14th of April 2011.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Rafael Escribano Torres.

- *Advanced Spectroscopy in Chemistry Master Course, Erasmus Mundus Programme of the EU, member of the Organizing Committee*, with participation of seven European Universities, from 2005 on.

José Luis Doménech

- *Espectroscopia láser en el laboratorio y detección remota en atmósferas*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th of April 2011.
- *Guided visit to the Infrared Laser Spectroscopy Laboratory*, part of the VIII “Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid, 13th of April 2011.

Óscar Gálvez

- *Hielos y Plasmas de Interés Atmosférico y Astrofísico*, part of the VIII “Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid, 13th of April 2011.

Víctor J. Herrero.

- *11th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics*, Coimbra 19-22nd of June 2011. Member of the scientific committee.

Belén Maté

- *Guided visit to the Astrophysical Ices Laboratory*, part of the VIII “Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid, 13th of April 2011.

Julio Santos Gómez.

- *Control Cuántico de Moléculas Dipolares Ultrafrías*, part of the VIII “Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th of April 2011.

Isabel Tanarro

- *Guided visit to the Cold Plasma Laboratory*, part of the VIII “Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th of April 2011.

Guzmán Tejeda Gala.

- *Espectroscopía Raman de Chorros Supersónicos*, part of the “VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13th of April 2011.

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz.

- *Nanolitografía con polímeros*, part of the “VIII 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, 13-15th of April 2011.

Víctor Cruz Cañas.

- *Modelización de biomembranas*, part of the “VIII 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, 13-15th of April 2011.

Mari Cruz García Gutiérrez and Mirta Rodríguez Pinilla.

- *VIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular* (Organizers), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13-15th of April 2011.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Jornada científico-técnica “Caracterización reológica de materiales mediante ensayos de reología rotacional”*, IEM/CSIC-IESMAT/MALVERN, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28th of September 2011.

Javier Ramos Díaz.

- *Modelos computacionales en biofísica macromolecular*, part of the “VIII 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, 13-15th of April 2011.

Michela Soccio.

- *Polímeros biodegradables y biocompatibles: desde la síntesis a la nanoestructuración*, part of the “VIII 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, 13-15th of April 2011.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

Jorge Dukelsky Bercovich

- Member of the International Organizing Conference *Advanced Many-Body and Statistical Methods in Mesoscopic Systems*. June 27–July 2, 2011. Constanta, Rumania.

Jesús Fernando Barbero González.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference on Quantum Gravity *Loops II* (Madrid, Spain).
- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the *XXInternational Fall Workshop on Geometry and Physics*, ICMAT-CSIC, Madrid (Spain).
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *ERE2011 Spanish Relativity Meeting*, Universidad Complutense de Madrid (Spain).

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference on Quantum Gravity *Loops II* (Madrid, Spain).

Rafael Alejandro Molina Fernández

- Member of the jury of the SINIF 2011 Research Prize.

Elvira Moya de Guerra.

- Vicepresident of the *Acceditation Committee of Science Professors* (ANECA), Madrid (Spain).
- Member of the *Editorial Board* of *The Annals of the Academy of Romanian Scientists* (Physics Series).
- Member of the FAIR Scientific Council (GSI, Germany).

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

Santiago Sánchez Cortés

- President of the Spectroscopy Committee of the *Spanish Society of Optics*.
- Member of the *Spanish Society of Optics* Advisory Committee.

M^a José García Borge

- Chair of the *ISOLDE Collaboration* Committee.
- Chair of the Editorial Board of the *Nuclear Physics News*.
- Spanish representative in the expert committee of *NuPECC of the ESF*.
- Member of the *HIE-ISOLDE Scientific* Committee.
- Member of the Advisory Committee for the future of the Center of Excellence for Radiative Ion Beam Studies for Stewardship Science (USA).
- Member of the Expert Committee of the *Laboratori du Sud*, Catania, Italy.
- Deputy Manager of the Plan Nacional de Partículas y Aceleradores.
- Nombrada *Doctor Honoris Causa* por la Universidad de Huelva, dic 2011.
- Member of the organizing committee of the *ISOLDE Workshop*, CERN, Geneva, Switzerland, 5-7 diciembre 2011.
- Member of the *International Advisory Committee* of PROCON'11(Int. Conf. Proton Emitting Nuclei and related topics) 6-11 June, Bordeaux (France) 2011.

José Vicente García Ramos

- Deputy Vicepresident of Scientific Programming of the *Consejo Superior de Investigaciones Científicas*.
- Member of the External Advisory Committee of the “Molecular Chemical Physics” 70/94 R&D Unit of the *University of Coimbra* (Portugal).

Olof Tengblad

- Deputy Technical Manager of the *R3B Project* at FAIR.
- Expert Panel evaluation FP7-PEOPLE-IEF-IIF-IOF-2011, *EU Research Executive Agency* 2011.

Carlos Cabrillo García.

- Member of Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FPA2) of the *ISIS Pulsed Neutron & muon source*.
- Member of the Scientific Committee *XVII Congreso de Física Estadística 2011*, Barcelona, Spain.
- Member of the Local Organizing Committee of the *VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas* since 2011, Spain.

José A. Sánchez Gil.

- Member of the Technical Program Committee of the conference *Metamaterials 2011*, Barcelona (Spain).

Sagrario Martínez Ramírez.

- Member of the Scientific and Scientific Advisory Committees of the Congress *International Congress on the Chemistry of Cement*, Madrid (Spain).
- Member of the Scientific and Local Organizing Committees of the Congress *Micro-Raman Spectroscopy and Luminescence Studies in the Earth and Planetary Sciences (Corals II)*, Madrid (Spain).

Paz Sevilla Sierra.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the Congress *14th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules*, Coimbra (Portugal).
- Member of the *Spanish Society of Optics* Advisory Committee.
- Member of the “Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICYT)” of “Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico (FONDECYT)” from Government of Chile. Secretary of Spectroscopy Committee of the *Spanish Society of Optics*.

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

- Member of the Steering Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.
- Member of the Steering Committee of the *CARS (Coherent Ant-stokes Raman Spectroscopy) Workshop* and *ECONOS (European Conference On Non-Linear Raman Spectroscopy)*.
- Member of the Steering Committee of the *International Conference on Spectral Line shapes*.
- Adjunct Professor of The University of Lethbridge.

Concepción Domingo Maroto.

- EOS Fellow (Fellow of the European Optical Society).
- Spanish Representative in the COST Action MP1102: “Coherent Raman Microscopy (microCoR)” (Program “Materials, Physical and Nanosciences”, MPNS).

Rafael Escribano Torres.

- Member of the Meetings Committee of the American Geophysical Union.

Víctor José Herrero.

- Member of the Experts Committee (Energy: Thermonuclear Fusion) of the Spanish Ministry of Science and Innovation.
- Member of the board of the “Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones”(ASEVA).
- Vicepresident of the board of the “Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular” (GEFAM) of the “Real Sociedad Española de Física” (RSEF).

Salvador Montero Martín.

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

Isabel Tanarro Onrubia.

- Member of the board of the “Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones”(ASEVA).
- Member of the board of the “Grupo de Plasmas” of the Real Sociedad Española de Física.
- Member of the Scientific Committee of the 39th European Physical Society Conference on Plasma Physics and 16th International Congress on Plasma Physics, to be held in Stockholm 2-6 July of 2012.

Belén Maté Naya.

- Vicepresident of the “Comité de Espectroscopia” of the Sociedad Española de Óptica.
- Member of the Scientific Committee of the XXIII Reunión Nacional de Espectroscopia, to be held in Cordoba 17-20 September of 2012.

Guzmán Tejeda Gala.

- Secretary of the Sociedad Española de Óptica (SEDOPTICA).

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* (SAC) of the French Synchrotron SOLEIL (France), since December 2005.
- Member of *Review Panel Committee* "Soft Condensed Matter and Scattering" of HASYLAB, DESY, Hamburg (Germany), since October 2006.
- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Peer Review Committee 3*, Chemistry, Condensed matter, Nano-chemistry, Soft condensed matter of the French Synchrotron SOLEIL, since January 2008.
- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Member of *Trusties of Board of Agencia Estatal CSIC*, Ministerio de Ciencia e Innovación, since March 2008.
- Member of the *Committee:Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, since March 1996.
- Member of the *Editorial Board* of the journal “e-Polymer”.
- *AssistantEditor* of the journal “e-Polymer”.

Aurora Nogales Ruiz.

- Member of the *Facility Access Panel 5. Spectroscopy* of the Neutron Facility ISIS at the Appleton Rutherford Laboratory since June 2011.
- Member of the *DUBBLE Assessment Committee* from the Netherlands Organization for Scientific Research (NWO) since April 2011.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the scientific committee of the POLYCHAR World Forum.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Member of the *Executive Board* of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE), since July 2007.
- *Spanish delegate* of the European Synchrotron Users Organization (ESUO), since January 2010.
- CSIC Expert at the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities of the European Union, since January 2010.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *V AUSE Conference*, Valencia (Spain).

Juan Francisco Vega Borrego.

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of *Real Sociedad Española de Química (RSEQ)*.

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Honorary Member* of the *Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Board of the Society* for International Studies (SEI), Madrid.
- *Honorary Member* of the *Akademie Mitteldeutsche Kunststoffinnovationen*, Merseburg, Germany.
- Member of the *Royal Academy of Sciences*, Barcelona.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Applied Polymer Science”.
- Member of *Editorial Board* of the “International Journal of Polymeric Materials”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Polymer Engineering”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Macromolecular Science-Physics”.
- Member of *Editorial Board* of the journal “e-Polymers”.

5.5 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH **ACTIVITIES AND MATERIAL**

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

José González Carmona

La revolución de la Física del carbono: fullerenos, nanotubos, grafeno.

Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

18th of November 2011.

Jesús Fernando Barbero González

Agujeros negros y física contemporánea.

Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

11st of November 2011.

¡Menudos Elementos!: Todo lo que usted quiso saber sobre la Tabla Periódica pero nunca se atrevió a preguntar.

Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

16th of November 2011.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

Ponga rigor en su serie.

El País. Participación en el artículo divulgativo de Patricia Gonsálvez.

http://www.elpais.com/articulo/Pantallas/Ponga/rigor/serie/elpepirtv/20110117elpepirtv_5/Tes

17th of January 2011.

Del Big Bang al Big Bounce.

Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas, UPM, Madrid.

3rd of May 2011.

Más allá de Einstein: 25 años de Gravedad Cuántica.

Fundación BBVA, Palacio del Marqués de Salamanca, Madrid.

(Conferencia de los Profs. A. Ahtekar y C. Rovelli. Organizador de la conferencia.)

20th of May 2011

Loop Quantum Gravity.

Museo CosmoCaixa, Alcobendas, Madrid.

(Coordinador de la jornada científica con la participación de los Profs. A. Ahtekar y C. Rovelli.)

25th of May 2011.

Art Exhibit – Luca Pozzi.

Fundación Pons, Madrid.

(Organizador de la exposición de fotografía y escultura sobre Loop Quantum Gravity.)

23rd-27th of May 2011

Luis Javier Garay Elizondo.

La física de los agujeros negros.

Semana de la Ciencia. Planetario de Madrid.

10th of November 2011.

Mikel Fernández Méndez

¿Física Cuántica o Relatividad General? Tribulaciones de un estudiante de tesis.

XI Semana de la Ciencia de la CAM.

Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

18th of November 2011.

¿Física Cuántica o Relatividad General? Tribulaciones de un estudiante de tesis.

Repositorio Digital.CSIC:<http://digital.csic.es/handle/10261/43153>

18th of November 2011.

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

Sagrario Martínez Ramírez

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”, XI Jornada de la Semana de la Ciencia.
Colegio María Virgen, Madrid (Spain).
11th of November 2011.

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”, XI Jornada de la Semana de la Ciencia.
C.P. San Eugenio y San Isidro, Madrid (Spain).
15th of November 2011.

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”, XI Jornada de la Semana de la Ciencia.
C.P. Ramiro de Maeztu, Madrid (Spain).
16th, 17th, 18th of November 2011.

Taller “Mis primeros pasos en la Investigación”, XI Jornada de la Semana de la Ciencia
Colegio Legamar, Madrid (Spain).
29th of November 2011.

Enrique Nácher González

Viaje al interior del núcleo (charla), XI Jornada de la Semana de la Ciencia
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid (Spain).
8th of November 2011.

5.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Víctor J. Herrero

La Química del Cosmos, Conference in the XI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
10th of November 2011.

José Ma. Fernández Sánchez y Guzmán Tejeda Gala

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular
(Charla y visita divulgativa de estudiantes de 2º Bachillerato del Colegio Arturo Soria de Madrid.)
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
14th of January 2011.

Isabel Tanarro Onrubia

Los Plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión,
Conference to Students of 2º of Bachillerato of Colegio Enseñanza Arturo Soria.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
14th of January 2011.

Guided visit to Cold Plasma Laboratory, students of 2º Bachillerato of Colegio Arturo Soria of Madrid.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
14th of January 2011.

Los Plasmas: de la Aurora Boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de Fusión,
Conference to Students of 2º of Bachillerato of IES Europa, Rivas Vaciamadrid.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
11th of February 2011.

Descubriendo el plasma,
Conference to Students of 2º de Bachillerato of the IES Francisco Umbral.Ciempozuelos. Madrid.
11th of March 2011.

Plasma, el cuarto estado de la materia,
Conference in the XI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
Instituto de Estructura de la Materia, (CSIC) Madrid.
7th of November 2011.

Plasma, de la Aurora Boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión. (Póster).
I Reunión de Coordinación de Cultura Científica del CSIC, 29-30 de Junio 2011. Madrid
29-30th of June 2011.

Belén Maté

Guided visit to the Astrophysical Ices Laboratory.
XI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
7th of November 2011.

Óscar Gálvez

Hielo en el Universo: de la Tierra al medio interestelar.
Conference in the XI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid.
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) Madrid.
November 2011.

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

José Carlos Canalda Cámara and Daniel E. Martínez Tong

La material condensada blanda: Tu día a día. ¿Acaso no lo sabías?
XI Semana de la Ciencia.
Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid.
November 2011.

Javier Martínez de Salazar Bascañana

Neurosim: Una inmersión en la estructura de la memoria.
Entrevista en el Boletín mensual IBERCIVIS.
May 2011.

5.6 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Speaker: Javier Martínez de Salazar Bascañana.
Title: Aproximación experimental y computacional a la estructura y función de macromoléculas sintéticas
Colaboration: IEM/Repsol-YPF.
Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).
Dates: 13th of September 2011.

Speaker: Víctor Cruz Cañas.
Title: 3D-QSAR en el análisis estructura-actividad de catalizadores “single-site” para polimerización
Colaboration: IEM/Repsol-YPF.
Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).
Dates: 13th of September 2011.

Speaker: Juan Francisco Vega Borrego.
Title: Modelización aplicada a la reología de poliolefinas.
Colaboration: IEM/Repsol-YPF.
Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).

Dates: 13th of September 2011.

Speaker: Sonia Martínez Hedo.

Title: Estudios computacionales del proceso de polimerización con incorporación de nuevos monómeros: Mecanismos, reactividad de los monómeros y composición del copolímero.

Colaboration: **IEM/Repsol-YPF.**

Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).

Dates: 13th of September 2011.

Speaker: Rafael Núñez Ramírez.

Title: Análisis estructural de macromoléculas mediante procesamiento digital de imágenes de Microscopía Electrónica de Transmisión.

Colaboration: **IEM/Repsol-YPF.**

Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).

Dates: 13th of September 2011.

Speaker: Javier Ramos Díaz.

Title: Métodos computacionales para el estudio de la relación estructura-propiedades de polímeros.

Colaboration: **IEM/Repsol-YPF.**

Place: Centro Tecnológico Repsol (Móstoles).

Dates: 13th of September 2011.

Informes de transferencia tecnológica

Rafael Núñez Ramírez, Juan Francisco Vega Borrego and Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Biophysical study of gp140, gp120 and CD4 proteins.

Sino Biological Ltd., Beijing (March 2011)

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means.III.

Dow Chemicals Ibérica, Tarragona (April 2011)

Reuniones de transferencia de tecnología:

Meeting attends: Tiberio A. Ezquerro.

Collaboration: FAE, S.A.

Place: Hospitalet de Llobregat (Barcelona).

Date: 11th of July 2011.

Meeting attends: Javier Martínez-Salazar, Victor Cruz Cañas, Juan Francisco Vega Borrego, Javier Ramos Díaz, Rafael Núñez Ramírez, and Sonia Martínez Hedo.

Collaboration: Repsol-YPF.

Place: Móstoles (Madrid).

Date: 13th of September 2011.

5.7 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

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

Unidades asociadas / Associated Units

- Unidad Asociada“*Grupo de Física Nuclear*”
IEM, CSIC (Pedro Sarriguren Suquilbide) and Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad Complutense de Madrid (E. Moya Valgañón).
Extended for 2011-2013.

Jorge Dukelsky Bercovich

- *Organización Del Workshop "Quantum Phase Transitions".*
Seville, 22nd of June 2011.
En colaboración con la Unidades Asociadas de Sevilla y Huelva.

Otras actividades / Other activities

Jorge Dukelsky Bercovich.Short stays:

- University of Delaware, USA. 20th-27th of February 2011.
- University of Padua, Italy. 18th-23rd of March 2011.
- University of Indiana, USA. 24th of February-3rd of March 2011.
- Universidad de Buenos Aires, Argentina. 19th-25th of August 2011.
- Universidad de La Plata, Argentina. 26th of August-2nd of September 2011.
- Universidad de Barcelona. 6th-11th of September 2011.
- Centro Atómico Bariloche. Universidad de Cuyo. Argentina. 3rd-14th of December 2011.

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

Unidades asociadas / Associated Units

- Unidad Asociada
IEM, CSIC (Santiago Sánchez Cortés) and Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular (Departamento de Química Física) de la Universidad de Málaga (Juan Carlos Otero).
Extended for 2009-2012.
- Unidad Asociada
IEM, CSIC (Concepción Domingo Maroto) and Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular (Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía) de la Universidad de Valladolid (José Antonio de Saja).
Extended for 2009-2012.

Otras actividades / Other activities

Sagrario Martínez Ramírez.

- Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN02/CTN-80. Propiedades Químicas, Madrid, Spain, June 2011.

5.7.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades asociadas / Associated Units

- Unidad Asociada “Molecular Physical Chemistry”
IEM-CSIC, IQFR-CSIC (Víctor J. Herrero) and Dpto. de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (F. Javier Aoiz).
Extended for 2009-2012.

5.7.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- Oxford Rutherford Appleton Laboratory, Oxford, UK, 28th of March-2nd of April 2011.
- Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona, 6th- 7th of April 2011.
- Workshop of ALBA users, Barcelona, 10th of June 2011.
- Universidade do Minho, Guimaraes, Portugal, 30th of June-1st of July 2011.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 19th-23th of July 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 1st-5th of September 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 28th of September-2nd of October 2011.
- Universidad de Grenoble, France, 2nd-3rd of November 2011.

Aurora Nogales Ruíz. Short stays:

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 1st-3rd of July 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 1st-6th of September 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 28th of September-2nd of October 2011.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 29th of June-2nd of July 2011.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 19-22nd of July 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 28th of September-2nd of October 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburg, Germany, 5-11th of November 2011.

Víctor Cruz Cañas. Short stays:

- Reunión Plenaria de la Red de e-Ciencia, Santander, 6th and 7th of June 2011.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- HASYLAB/DESY, Hamburg, Germany, 29th of March-1st of April 2011.
- Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona, 6 and 7th of April 2011.
- Workshop of ALBA users, Barcelona, 10th of June 2011.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 19-23th of July 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburgo, Germany, 28th of September-2nd of October 2011.
- Universidad de Valladolid, 27th of October 2011.
- HASYLAB/DESY, Hamburg, Germany, 8th-11th of November 2011.

Michelina Soccio.

- Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona, 6th-7th of April 2011.
- Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona, 24th of October-21st of November 2011.

Francisco J. Baltá Calleja. Short stays:

- Workshop Composites Processing and Properties en École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland, 1st-3rd of December 2011.

Juan Felipe Franco González.

- “European Master on Theoretical and Modelling Chemistry”, Palma de Mallorca, 23rd-27th of January and 29th of January-19th of February.

- Scientific collaboration on “Dinámica de estados moleculares excitados inducidos por pulsos cortos”. Universidad de Zaragoza, 29th of May-4th of June 2011.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato. Short stays:

- Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica de Barcelona, 6th -7th of April 2011.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 19th-22nd of July 2011.

Daniel E. Martínez Tong. Short stays:

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 29th of June-3rd of July 2011.

TEM-BIOPHYM facility

(Redaction in Spanish)

- En la instalación de Microscopía Electrónica de Transmisión se lleva a cabo, además de una parte importante de la actividad científica del BIOPHYM, labores de apoyo a la investigación de otros equipos tanto del Instituto de Estructura de la Materia como de otros centros como el Instituto de Química Física Rocasolano y el Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros.
- Existe de hecho un amplio grupo de usuarios, asociados a través de la página web del grupo BIOPHYM, con el que se llevan a cabo reuniones periódicas (<http://www.gemppo.iem.csic.es/tem/>).
- Hay que destacar que los resultados de estas labores de apoyo han dado como resultado 5 publicaciones científicas, y 2 presentaciones en congresos nacionales e internacionales. Asimismo, los resultados forman parte de los proyectos de investigación que se desarrollan en 3 Tesis Doctorales.

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. R. Álvarez-Rodríguez, A.S. Jensen, D.V. Fedorov, and E. Garrido.
Momentum Distributions from Three-Body Decaying ^9Be and ^9B Resonances.
International Journal of Modern Physics E **20**, 827 (2011).
2. L. C. Barbado, C. Barceló and L. J. Garay.
Hawking Radiation as Perceived by Different Observers.
Class. Quant. Grav. **28**, 125021 (2011).
3. L. C. Barbado, C. Barceló, L. J. Garay and G. Jannes.
The Trans-Planckian Problem as a Guiding Principle.
JHEP **11**, 112 (2011).
4. J. F. Barbero G. and E. J. S. Villaseñor.
Statistical Description of the Black Hole Degeneracy Spectrum.
Physical Review D **83**, 104013 (2011).
5. J. F. Barbero G. and E. J. S. Villaseñor.
The Thermodynamic Limit and Black Hole Entropy in the Area Ensemble.
Classical and Quantum Gravity **28**, 215014 (2011).
6. C. Barcelo, L. J. Garay and G. Jannes.
Quantum Non-Gravity and Stellar Collapse.
Found. Phys. **41**, 1532 (2011).
7. J. Barea, C.E. Alonso, J.M. Arias.
Odd-Even (147-153) Pm Isotopes within the Neutron-Proton Interacting Boson-Fermion Model.
Physical Review C **83**, 024307 (2011).
8. D. Brizuela, G. A. Mena Marugán and T. Pawłowski.
Effective Dynamics of the Hybrid Quantization of the Gowdy T3 Universe.
Physical Review D **84**, 124017 (2011).
9. J. Cal-González, J.L Herraiz, S. España, E. Vicente, E. Herranz, M. Desco, J.J. Vaquero, J.M. Udías.
Study of CT-Based Positron Range Correction in High Resolution 3D PET Imaging.
Nuclear instruments & methods in physics research section a-accelerators spectrometers detectors and associated equipment **648**, S172 (2011).
10. J. Cortez, G. A. Mena Marugán, J. Olmedo and J.M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock Quantization of Fields with Unitary Dynamics in Nonstationary Spacetimes.
Physical Review D **83**, 025002 (2011).
11. J. Cortez, G. A. Mena Marugán, J. Olmedo and J.M. Velhinho.
A Uniqueness Criterion for the Fock Quantization of Scalar Fields with Time-Dependent Mass.
Classical and Quantum Gravity **28**, 172001 (2011).
12. R. Crespo, M. Rodríguez-Gallardo, A.M. Moro, A. Deltuva, E. Cravo, and A.C. Fonseca.
Resonant Breakup of ^{19}C on a Proton Target.
Physical Review C **83**, 054613 (2011).
13. R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.
The Triple Alpha Reaction Rate and the 2^+ Resonances in ^{12}C .

- Physics Letters B **695**, 324 (2011).
14. R. de Diego, E. Garrido, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen.
Relative Production Rates of ${}^6\text{He}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{12}\text{C}$ in Astrophysical Environments.
Few-body Systems **50**, 331 (2011).
 15. J. Dukelsky, S. Lerma H., L. M. Robledo, R. Rodriguez-Guzman, and S. M. A. Rombouts.
Exactly Solvable pairing Hamiltonian for Heavy Nuclei.
Physical Review C **84**, 061301(R) (2011).
 16. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra.
Surface Properties of Neutron-Rich Exotic Nuclei: A Source for Studying the Nuclear Symmetry Energy.
Physical Review C **84**, 034316 (2011).
 17. E. Garrido, R. de Diego, D.V. Fedorov, and A.S. Jensen
Direct and Sequential Radiative Three-Body Reaction Rates at Low Temperatures.
European Physical Journal A **47**, 102 (2011).
 18. J.M.G. Gómez, K. Kar, V.K.B. Kota, R.A. Molina, A. Relaño, and J. Retamosa.
Many-Body Quantum Chaos: Recent Results in Quantum Chaos and Its Applications to Atomic Nuclei.
Phys. Rep. **499**, 103 (2011).
 19. F. Guinea, M. A. H. Vozmediano, M. P. López-Sancho and J. González.
Progress in Modeling Graphene: The Novel Features of this Material.
Adv. Mater. **23**, 5324 (2011).
 20. J. Hakala, R. Rodriguez-Guzman, ... et al.
Precision Mass Measurements of Neutron-Rich Y, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, and Pd Isotopes.
European Physical Journal A **47**, 11129 (2011).
 21. A.S. Jensen, D.V. Fedorov, R. de Diego, E. Garrido, and R. Álvarez-Rodríguez.
Few-Body Decay and Recombination in Nuclear Astrophysics.
Few-body Systems **50**, 53 (2011).
 22. A. Kievsky, E. Garrido, C. Romero-Redondo, and P. Barletta.
The Helium Trimer with Soft-Core Potentials.
Few body Systems **51**, 259 (2011).
 23. V.K.B. Kota, A. Relaño, J. Retamosa, and M. Vyas
Thermalization in the Two-Body Random Ensemble
J. of Stat. Mech.: Theory and Experiment P10028 (2011).
 24. D. Lauvergnat, M. L. Senent, L. Jutier, and M. Hochlaf.
Explicitly Correlated Treatment of H_2NSi and H_2SiN Radicals: Electronic Structure Calculations and Rovibrational Spectra.
J. Chem. Phys. **135**, 074301 (2011).
 25. S.Lerma H., S. M. A. Rombouts, J. Dukelsky, and G. Ortiz.
Integrable Two-Channel $px+ipy$ -Wave Model of a Superfluid.
Physical Review B **84**, 100503(R) (2011).
 26. S.P. Malace, ..., J.R. Vignote et al.
Precise Extraction of the Induced Polarization in the $({}^4\text{He}(e,e'p){}^3\text{H})$ Reaction.
Physical Review Letters **106**, 052501 (2011).
 27. M. Martín-Benito, D. Martín-de Blas, G. A. Mena Marugán.
Matter in Inhomogeneous Loop Quantum Cosmology: The Gowdy T^3 Model.
Physical Review D **83**, 084050 (2011).
 28. G. A. Mena Marugán, J. Olmedo and T. Pawłowski.

Prescriptions in Loop Quantum Cosmology: A Comparative Analysis.
Physical Review D **84**, 064012 (2011).

29. K. Nomura, T. Otsuka, R. Rodriguez-Guzman, L.M. Robledo, P. Sarriguren.
Structural Evolution in Pt Isotopes with the Interacting Boson Model Hamiltonian Derived from the Gogny Energy Density Functional.
Physical Review C **83**, 014309 (2011).
30. K. Nomura, T. Otsuka, R. Rodriguez-Guzman, L.M. Robledo, P. Sarriguren, P.H. Regan, P.D. Stevenson, Zs. Podolyak.
Spectroscopic Calculations of the Low-Lying Structure in Exotic Os and W Isotopes.
Physical Review C **83**, 054303 (2011).
31. K. Nomura, T. Otsuka, R. Rodriguez-Guzman, L.M. Robledo, P. Sarriguren.
Collective Structural Evolution in Neutron-Rich Yb, Hf, W, Os and Pt Isotopes.
Physical Review C **84**, 054316 (2011).
32. G. J. Olmo.
Palatini Actions and Quantum Gravity Phenomenology.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, 018 (2011).
33. G. J. Olmo, H. Sanchis-Alepuz.
Hamiltonian Formulation of Palatini $f(R)$ Theories a la Brans-Dicke Theory.
Physical Review D **83**, 104036 (2011).
34. P. Pérez-Fernández, P. Cejnar, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos and A. Relaño.
Quantum Quench Influenced by an Excited-State Phase Transition.
Physical Review A **83**, 033802 (2011).
35. P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, P. Cejnar, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos.
Excited-State Phase Transition and Onset of Chaos in Quantum Optical Models.
Physical Review E **83**, 046208 (2011).
36. K. C. C. Pires, ..., M. Rodríguez-Gallardo, ..., et. al.
Experimental Study of ${}^6\text{He} + {}^9\text{Be}$ Elastic Scattering at Low Energies.
Physical Review C **83**, 064603 (2011).
37. E. Prada, P. San-Jose, L. Brey, H.A. Fertig.
Band Topology and the Quantum Spin Hall Effect in Bilayer Graphene.
Solid State Communications **151**, 1075 (2011).
38. E. Prada, P. San-Jose, H. Schomerus.
Gate Driven Adiabatic Quantum Pumping in Graphene.
Solid State Communications **151**, 1065 (2011).
39. M. Rodríguez-Gallardo and A.M. Moro.
Four-Body Continuum-Discretized Coupled-Channel Calculations Applied to ${}^6\text{He}$ Reactions around the Coulomb Barrier.
International Journal of Modern Physics E **20**, 947 (2011).
40. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren, L.M. Robledo.
Shape Evolution in Yttrium and Niobium Neutron-Rich Isotopes.
Physical Review C **83**, 044307 (2011).
41. C. Romero-Redondo, E. Garrido, P. Barletta, A. Kievsky, and M. Viviani.
General Integral Relations for the Description of Scattering States Using the Hyperspherical Adiabatic Basis.
Physics Review A **83**, 022705 (2011).
42. C. Romero-Redondo, E. Garrido, A. Kievsky, P. Barletta, and M. Viviani.

- Integral Relations for Multichannel Reactions.*
Few-Body Systems **50**, 459 (2011)
43. P. San José, E. Prada, S. Kohler, H. Schomerus.
Single-Parameter Dumping in Graphene.
Physical Review B **84**, 155408 (2011)
44. P. San-José, J. González, and F. Guinea.
Electron-Induced Rippling in Graphene.
Physical Review Letters **106**, 045502 (2011).
45. P. Sarriguren.
Stellar Weak Decay Rates in Neutron-Deficient Medium-Mass Nuclei.
Physical Review C **83**, 025801 (2011).
46. M. L. Senent.
Ab Initio Spectroscopic Studies of Non-Rigid Molecules: An Application to Acetic Acid.
J. Math. Chem. **49**, 1424 (2011).
47. A. Valcarce, E. Hernandez, E. Garrido.
21st European Conference on Few-Body Problems in Physics (Salamanca 2010) Preface.
Few-Body Systems **50**, 1 (2011).
48. M. Villa, M. L. Senent, R. Domínguez-Gómez, O. Alvarez, and M. Carvajal-Zaera.
CCSD(T) Study of Dimethyl-Ether Infrared and Raman Spectra.
J. Phys. Chem. A **115**, 13573 (2011).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDER MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT

49. N. Antonov, M.J.G. Borge, E. Garrido, P. Sarriguren, J.R. Vignote, E. Moya de Guerra et al.
The Electron-Ion Scattering Experiment ELISE at the International Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR)- A Conceptual Design Study.
Nuclear Instruments and Methods A **637**, 60 (2011).
50. B. Perez-Cerdan, B. Rubio, W. Gelletly, A. Algora, J. Agramunt, K. Burkard, W. Huller, E. Nacher, P. Sarriguren, L. Caballero, F. Molina, L.M. Fraile, E. Reillo, M.J.G. Borge, Ph. Dessagne, A. Jungclaus, M.D. Salsac.
Beta-Decay of ^{78}Sr .
Physical Review C **84**, 054311 (2011).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MOLECULAR / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

51. J. Santos, R. A.Molina, J. Ortigoso, and M. Rodríguez.
Tailored Particle Current in an Optical Lattice by a Walk Time-Symmetric Potential.
Physical Review A. **84**, 023614 (2011).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

52. R. Alvarez-Rodriguez, J.M. Udias, J.R. Vignote, E. Garrido, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, E. Pace, A. Kievsky, G. Salme.
Relativistic Description of $^3\text{He}(e,e'p)^2\text{H}$.
Few-Body Systems **50**, 359 (2011).
53. J. F. Barbero G.
Black Hole Entropy: Lessons from Loop Quantum Gravity.
Journal of Physics: Conference Series **314**, 012003 (2011).
54. J. Dukelsky, S. Rombouts, G. Ortiz.

Richardson-Gaudin Models: The Hyperbolic Family.
Journal of Physics: Conference Series **321**, 012001 (2011).

55. J.M.G. Gómez, E. Faleiro, L. Muñoz, R.A. Molina, A. Relaño, J. Retamosa.
Recent Results in Quantum Chaos and Its Applications to Atomic Nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **267**, 012061(2011).
56. M. Martin-Benito, L. J. Garay, and G. A. Mena Marugán.
Quantum Gowdy Model within the New Loop Quantum Cosmology Improved Dynamics.
Journal of Physics: Conference Series **314**, 012047 (2011).
57. G. A. Mena Marugán.
Loop Quantum Cosmology: A Cosmological Theory with a View.
Journal of Physics: Conference Series **314**, 012012 (2011).
58. O. Moreno, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J.M. Udias, T.W. Donnelly, I.Sick.
Neutron Densities from Parity-Violating Elastic Electron Scattering.
Journal of Physics: Conference Series **312**, 092044 (2011).
59. O. Moreno, J.M. Boillos, E. Moya de Guerra.
Selected Topics on Nuclear Structure in Electroweak Processes.
AIP Conference Proceedings **1417**, 84 (2011).
60. E. Moya de Guerra, O. Moreno, P. Sarriguren.
Selected Topics on Nuclear Structure in Electroweak Processes.
AIP Conference Proceedings **1377**, 172 (2011).
61. E. Moya de Guerra, O. Moreno, P. Sarriguren.
Remodelling the Spin-Orbit Term of Skyrme Energy Density Functional.
Proceedings of the International Nuclear Physics Conference (INPC2010).
Journal of Physics: Conference Series **312**, 092045 (2011).
62. J. Olmedo, M. Martín Benito, and G. A. Mena Marugán.
Further Improvements in the Understanding of LQC.
Journal of Physics: Conference Series **314**, 012048 (2011).
63. R. Rodriguez-Guzman, P. Sarriguren, L.M. Robledo.
Signatures of Structural Changes in Neutron-Rich Sr, Zr and Mo Isotopes.
AIP Conference Proceedings **1377**, 291 (2011).
64. C. Romero-Redondo, E. Garrido, A. Kievsky, P. Barletta, and M. Viviani.
Multichannel Reactions Using the Adiabatic Expansion Method.
Journal of Physics: Conference Series **312**, 082036 (2011).
65. N. Sandulescu, J. Dukelsky and D. Negrea.
Pairing and Alpha-like Quartet Condensation in $N=Z$ Nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **321**, 012001 (2011).
66. P. Sarriguren.
Weak Decay Rates for Neutron-Deficient Kr Isotopes Relevant for the rp Process.
AIP Conference Proceedings **1377**, 23 (2011).

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

67. L. Acosta, A. M. Sanchez-Benitez, M. E. Gomez, I. Martel, F. Perez-Bernal, F. Pizarro, J. Rodriguez-Quintero, K. Rusek, M. A. G. Alvarez, M. V. Andres, J. M. Espino, J. P. Fernandez-Garcia, J. Gomez-Camacho, A. M. Moro, C. Angulo, J. Cabrera, E. Casarejos, P. Demaret, M. J. G. Borge, D. Escrig, O.

- Tengblad, S. Cherubini, P. Figuera, M. Gulino, M. Freer, C. Metelko, V. Ziman, R. Raabe, I. Mukha, D. Smirnov, O. R. Kakuee, J. Rahighi.
Elastic Scattering and Alpha-Particle Production in (6) He+(208)Pb Collisions at 22 MeV.
Physical Review C **84**, 044604 (2011).
68. M. Alcorta, M.J.G Borge, M. Cubero, C.A. Diget, R. Dominguez-Reyes, L. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U Fynbo, D. Galaviz, S. Hyldegaard, H.B. Jeppesen, B. Jonson, O.S. Kirsebom, M. Madurga, A. Maira, A. Muñoz, T. Nilsson, G. Nyman, D. Obradors, A. Perea, K. Riisager, O. Tengblad, M. Turrion.
Properties of Resonances in (12) C above the Triple-Alpha Threshold.
Nuclear Structure **312**, 092013 (2011).
69. A. E. Aliaga, T. Aguayo, C. Garrido, E. Clavijo, E. Hevia, J. S. Gomez-Jeria, P. Leyton, M. M. Campos-Valette, S. Sanchez-Cortes.
Surface-Enhanced Raman Scattering and Theoretical Studies of the C-Terminal Peptide of the beta-Subunit Human Chorionic Gonadotropin Without Linked Carbohydrates.
Biopolymers **95**,135 (2011).
70. C. .Cabrillo, E. . Enciso, M. . J. . Capitan, A. . Cabanas, M. . J. . Torralvo, J. . Alvarez and F. J. Bermejo.
Numerically Efficient Real Space Theory of Scattering from Colloidal Crystals.
Langmuir**27**, 2219 (2011).
71. J. J. Camacho, L. Diaz, J. P. Cid, J.M.L. Poyato.
Time-Resolved Spectroscopic Diagnostic of the CO₂ Plasma Induced by a High Power TEA-CO₂ Pulsed Laser.
Spectrochimica Acta Part B**66**, 698 (2011).
72. J. J. Camacho, L. Díaz, M. Santos, L. J. Juan, J.M.L. Poyato.
Time-Resolved Optical Emission Spectroscopic Study of He Plasma Induced by a High-Power TEA-CO₂ Pulsed Laser.
Spectrochimica Acta Part B **66**, 57 (2011).
73. J. J. Camacho, J. M. L. Poyato, L. Díaz, M. Santos.
Time-Resolved Spectroscopic Diagnostic of Laser-Induced Plasma on Germanium Targets.
Journal of Applied Physics **109**, 103304 (2011).
74. P.M. Carmona, J. Rubio, M.J. Sánchez, S. Martínez-Ramírez, M. T- Blanco-Varela.
Surface Dispersive Energy Determined with IGC-ID in Anti-Graffiti-Coated Building Materials.
Progress in Organic Coatings **71**,207 (2011).
75. P. Carmona, C. Ruiz-Capillas, F. Jiménez-Colmenero, T. Pintado, and A. M. Herrero.
Infrared Study of Structural Characteristics of Frankfurters Formulated with Olive Oil-in Water Emulsions Stabilized with Casein as Pork Backfat Replacer.
Journal of Agricultural and Food Chemistry **59**, 12998 (2011).
76. M. A. Fraser, F. Zocca, R. M. Jones, M. Pasini, P. A. Posocco, D. Voulot, and F. Wenander.
Longitudinal Emittance Measurements at REX-ISOLDE.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**663**, 1 (2011).
77. O. Francioso, S. Sanchez-Cortes, S. Bonora, M. L. Roldan, G. Certini.
Structural Characterization of Charcoal Size-Fractions from a Burnt Pinus Pinea Forest by FT-IR, Raman and Surface-Enhanced Raman Spectroscopies.
Journal of Molecular Structure **994**, 155 (2011).
78. M. C. Fuss, A. Munoz, J. C. Oller, F. Blanco, A. Williard, P. Lima-Vieira, M. J. G. Borge, O. Tengblad, C. Huerga, M. Tellez, G. Garcia.
Energy Deposition by a (106) Ru/(106)Rh Eye Applicator Simulated Using LEPTS, a Low-Energy Particle Track Simulation.
Applied Radiation Isotopes **69**, 1198 (2011).

79. L. Guerrini, S. Sanchez-Cortes, V. L. Cruz, S. Martinez, S. Ristori, A. Feis.
Surface-Enhanced Raman Spectra of Dimethoate and Omethoate.
Journal of Raman Spectroscopy **42**, 980 (2011).
80. L. Guerrini, L. Hartsuiker, S. Manohar, C. Otto
Monomer Adsorption of Indocyanine Green to Gold Nanoparticles.
Nanoscale **3**, 4247 (2011).
81. U. Hager, J. R. Brown, L. Buchmann, M. Carmona-Gallardo, L. Erikson, J. Fallis, U. Greife, D. Hutcheon, D. Ottewell, C. Ruiz, S. Sjuve, and C. Vockenhuber.
Direct Total Cross Section Measurement of the $^{16}\text{O}(\alpha,\gamma)^{20}\text{Ne}$ Reaction at $E_{c.m.} = 2.26$ MeV.
Physical Review C **84**, 022801(R) (2011).
82. H. Hassanzadegan, N. Garmendia, V. Etxebarria and F. J. Bermejo.
Low Level rf System for the European Spallation Source's Bilbao linac.
Physical Review Special Topics-accelerators Beams **14**, 052803 (2011).
83. A.M. Herrero, P. Carmona, T. Pintado, F. Jiménez-Colmenero and C. Ruiz-Capillas.
Olive Oil-in-Water Emulsions Stabilized with Caseinate: Elucidation of Protein-Lipid Interactions by Infrared Spectroscopy.
Food Hydrocolloids **25**, 12 (2011).
84. A.M. Herrero, P. Carmona, T. Pintado, F. Jiménez-Colmenero, and C. Ruiz-Capillas.
Infrared Spectroscopic Analysis of Structural Features and Interactions in Olive Oil-in-Water Emulsions Stabilized with Soy Protein.
Food Research International **44**, 360 (2011).
85. N. Husillos, S. Martínez-Ramírez, M.T. Blanco-Varela, M. Guillen, J. Puig, E. Larrotcha, J. Flores.
Evaluation of Spray-Dried Sludge from Drinking Water Treatment Plants as a Prime Material for Clinker Manufacture.
Cement and Concrete Composite **33**, 267 (2011).
86. I. Iriepa, J. Bellanato.
Synthesis, Structural, Conformational and Pharmacological Study of some Carbamates Derived from 8-Methyl-8-Azabicyclo[3.2.1]Octan-3 α -ol.
Journal of Molecular Structure **1006**, 508 (2011).
87. I. Izquierdo-Lorenzo, S. Sanchez-Cortes, J. V. Garcia-Ramos.
Trace Detection of Aminoglutethimide Drug by Surface-Enhanced Raman Spectroscopy: A Vibrational and Adsorption Study on Gold Nanoparticles.
Analytical Methods **3**, 1540 (2011).
88. A. Jungclauss, J. Walker, J. Leske, K.-H. Speidel, A. E. Stuchbery, M. East, P. Boutachkov, J. Cederkall, P. Doornenbal, J. L. Egido, A. Ekstrom, J. Gerl, R. Gernhäuser, N. Goel, M. Górska, I. Kojouharov, P. Maier-Komor, V. Modamio, F. Naqvi, N. Pietralla, S. Pietri, W. Prokopowicz, H. Schaffner, R. Schwengner, and H.-J. Wollersheim.
Evidence for Reduced Collectivity around the Neutron Mid-Shell in the Stable Even-Mass Sn Isotopes from New Lifetime Measurement.
Physics Letters B **695**, 110 (2011).
89. Z. Jurasekova, S. Sanchez-Cortes, M. Tamba, A. Torreggiani.
Silver Nanoparticles Active as Surface-Enhanced Raman Scattering Substrates Prepared by High Energy Irradiation.
Vibrational Spectroscopy **57**, 42 (2011).
90. O. S. Kirsebom, H. O. U. Fynbo, A. Jokinen, M. Madurga, K. Riisager, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J. Aysto.
New Beta-Delayed Proton Lines from $(^{23})\text{Al}$.
European Physical Journal A **47**, 130 (2011).

91. O. S. Kirsebom, S. Hyldegaard, M. Alcorta, M. J. G. Borge, J. Buscher, T. Eronen, S. Fox, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, H. Hultgren, A. Jokinen, B. Jonson, A. Kankainen, P. Karvonen, T. Kessler, A. Laird, M. Madurga, I. Moore, G. Nyman, H. Penttila, S. Rahaman, M. Reponen, K. Riisager, T. Roger, J. Ronkainen, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J. Äystö.
Precise and Accurate Determination of the (8)B Decay Spectrum.
Physical Review C **83**, 065802 (2011).
92. G. G Kiss, P. Mohr, Zs. Fueloep, Gy. Gyuerky, Z. Elekes, J. Farkas, E. Somorjai, C. Yalcin, D. Galaviz, R.T Guray, N. Ozcan, J. Goerres.
(110,116)Cd (Alpha, Alpha) (110,116) Cd Elastic Scattering and Systematic Investigation of Elastic Scattering Cross Sections along the Z=48 Isotopic and N=62 Isotonic Chains.
Physical Review C **83**, 065807 (2011).
93. A. I. Krivchikov, F. J. Bermejo, I. V. Sharapova, O. A. Korolyuk, and O. O. Romantsova.
Deuteration Effects in the Thermal Conductivity of Molecular Glasses.
Low Temperature Physics **37**, 517 (2011).
94. A. I. Krivchikov, O. A. Korolyuk, I. V. Sharapova, O. O. Romantsova, F. J. Bermejo, C. Cabrillo, R. Fernandez-Perea, and I. Bustinduy.
Thermal Conductivity of Glassy Primary Mono-Hydroxylalcohols.
Journal of Non-Crystalline Solids **357**, 483 (2011).
95. P. Lopez-Arce, L.S. Gómez-Villalba, S. Martínez-Ramírez, M. Álvarez del Buergo, R. Fort.
Influence of Relative Humidity on the Carbonation of Calcium Hydroxide Nanoparticles and the Formation of Calcium Carbonate Polymorphs.
Power Technology **205**, 263 (2011).
96. I. López-Tocón, J. C. Otero, J. F. Arenas, J. V. Garcia-Ramos, S. Sanchez-Cortes.
Multicomponent Direct Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Using Silver Nanoparticles Functionalized with the Viologen Host Lucigenin.
Analytical Chemistry **83**, 2518 (2011).
97. L. A. Martínez-Cruz, J. A. Encinar, P. Sevilla, I. Oyenarte, I. Gómez-García, D. Aguado-Llera, F. García-Blanco, J. Gómez, J. L. Neira
Nucleotide-Induced Conformational Transitions in the CBS Domain Protein MJ0729 of Methanocaldococcus jannaschii.
Protein Engineering Design and Selection **24**, 161 (2011).
98. S. Martinez-Ramirez, M.T. Blanco-Varela, J. Rapazote.
Thaumasite Formation in Sugary Solutions. Effect of Temperature and Sucrose Concentration.
Construction and Building Materials **25**, 25 (2011).
99. S. Martínez-Ramírez, M. Frías.
Micro-Raman Study of Stable and Metastable Phases in Metakaolin/Ca(OH)₂ System Cured at 60°C.
Applied Clay Science **51**, 283 (2011).
100. D. Montanari, S. Leoni, L. Corradi, G. Pollarolo, G. Benzonib, N. Blasi, S. Bottoni, A. Bracco, F. Camera, A. Corsi, F. C. L. Crespi, B. Million, R. Nicolini, O. Wieland, G. de Angelis, F. Della Vedova, E. Fioretto, A. Gadea, B. Guiot, D. Mengoni, D. R. Napoli, R. Orlandi, F. Recchia, A. M. Stefanini, R. P. Singh, J. J. Valiente-Dobon, D. Bazzacco, E. Farnea, S. M. Lenzi, S. Lunardi, G. Montagnoli, F. Scarlassara, C. Ur, G. Lo Bianco, A. Zucchiatti, S. Szilner, M. Kmiecik, A. Maj, and W. Meczynski.
Elastic, Inelastic, and One-Nucleon Transfer Processes in ⁴⁸Ca + ⁶⁴Ni.
Physical Review C **84**, 054613 (2011).
101. D. Montanari, S. Leoni, D. Mengonic, G. Benzonib, N. Blasi, G. Bocchi, P. F. Bortignon, A. Braccob, F. Camera, G. Colò, A. Corsi, F.C.L. Crespi, B. Million, R. Nicolini, O. Wieland, J.J. Valiente-Dobon, L. Corradi, G. de Angelis, F. Della Vedova e, E. Fioretto, A. Gadea, D.R. Napoli, R. Orlandi, F. Recchia, E. Sahin, R. Silvestri, A.M. Stefanini e, R.P. Singh, S. Szilner, D. Bazzacco, E. Farnea, R. Menegazzo, A. Gottardo, S.M. Lenzi, S. Lunardi, G. Montagnoli, F. Scarlassara, C. Ur, G. Lo Bianco, A. Zucchiatti, M. Kmiecik, A. Maj, W. Meczynski, A. Dewald, Th. Pissulla, G. Pollarolo.

- Probing the Nature of Particle–Core Couplings in ^{49}Ca with γ -Spectroscopy and Heavy-Ion Transfer Reactions.*
Physics Letters B **697**, 288 (2011).
102. R. Paniagua-Domínguez, F. López-Tejeira, R. Marqués, J.A. Sánchez-Gil.
Metallo-Dielectric Core-Shell Nanospheres as Building Blocks for Optical Three-Dimensional Isotropic Negative-Index Metamaterials.
New J. Phys. **13**, 123017 (2011).
103. S. Pietri, A. Jungclaus, M. Górska, H. Grawe, M. Pfützner, L. Cáceres, P. Detistov, S. Lalkowski, V. Modamio, Z. Podolyak, P.H. Regan, D. Rudolph, J. Walker, E. Werner-Malento, P. Bednarczyk, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Gerl, J. Grebosz, I. Kojouharov, N. Kurz, W. Prokopowicz, H. Schaffner, H.J. Wollersheim, K. Andgren, J. Benlliure, G. Benzoni, A.M. Bruce, E. Casarejos, B. Cederwall, F.C.L. Crespi, B. Hadinia, M. Hellström, R. Hoischen, G. Ilie, A. Khaplanov, M. Kmiecik, R. Kumar, A. Maj, S. Mandal, F. Montes, S. Myalski, G. Simpson, S.J. Steer, S. Tashenov, and O. Wieland.
First Observation of the Decay of a 15^- Seniority $\nu=4$ Isomer in ^{128}Sn .
Physical Review C **83**, 044328 (2011).
104. R. Rodríguez-Oliveros and J.A. Sánchez-Gil.
Localized Surface-Plasmon Resonances on Single and Coupled Nanoparticles through Surface Integral Equations for Flexible Surfaces.
Opt. Express **19**, 12208 (2011).
105. C. Rodríguez-Tajes, D. Cortina-Gil, H. Alvarez-Pol, T. Aumann, E. Benjamim, J. Benlliure, M. J. G. Borge, M. Caamano, E. Casarejos, A. Chatillon, L. V. Chulkov, K. Eppinger, T. Faestermann, M. Gascon, H. Geissel, R. Gernhäuser, B. Jonson, R. Kanungo, R. Kanungo, R. Kruecken, T. Kurtukian, K. Larsson, P. Maierbeck, T. Nilsson, C. Nociforo, Yu. Parfenova, C. Pascual-Izarra, A. Perea, D. Perez-Loureiro, A. Prochazka, S. Schwertel, H. Simon, K. Suemmerer, O. Tengblad, H. Weick, M. Winkler, M. V. Zhukov.
Structure of $(22)N$ and the $N=14$ Subshell.
Physical Review C **83**, 064313 (2011).
106. M.L. Roldan, G. Corrado, O. Francioso, S. Sanchez-Cortes.
Interaction of Soil Humic Acids with Herbicide Paraquat Analyzed by Surface-Enhanced Raman Scattering and Fluorescence Spectroscopy on Silver Plasmonic Nanoparticles.
Analytica Chimica Acta **699**, 87 (2011).
107. M. Rovira-Esteva, N. A. . Murugan, L. C. Pardo, S. Busch, J. Ll. Tamarit, Sz. Pothoczki, G. J. Cuello, and F. J. Bermejo.
Interplay between Intramolecular and Intermolecular Structures of 1,1,2,2-Tetrachloro-1,2-Difluoroethane.
Physical Review B **84**, 064202 (2011).
108. P.-A. Söderströma, F. Recchia, J. Nyberg, A. Al-Adili, A. Ataç, S. Aydin, D. Bazzacco, P. Bednarczyk, B. Birkenbach, D. Bortolato, A. J. Boston, H. C. Boston, B. Bruyneel, D. Bucurescu, E. Calore, S. Colosimo, F. C. L. Crespi, N. Dosme, J. Eberth, E. Farnea, F. Filmer, A. Gadea, A. Gottardo, X. Grave, J. Grebosz, R. Griffiths, M. Gulmini, T. Habermann, H. Hess, G. Jaworski, P. Jones, P. Joshi, D.S. Judson, R. Kempley, A. Khaplanov, E. Legay, D. Lersch, J. Ljungvall, A. Lopez-Martens, W. Meczynski, D. Mengoni, C. Michelagnoli, P. Molini, D. R. Napoli, R. Orlandi, G. Pascovici, A. Pullia, P. Reiter, E. Sahin, J. F. Smith, J. Strachan, D. Tonev, C. Unsworth, C.A. Ur, J. J. Valiente-Dobón, C. Veysiére, A. Wiens.
Interaction Position Resolution Simulations and in-Beam Measurements of the AGATA HPGc Detectors.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **638**, 96 (2011).
109. J. Souin, T. Eronen, P. Ascher, L. Audirac, J. Aysto, B. Blank, V.V. Elomaa, J. Giovinazzo, J. Hakala, A. Jokinen, V.S. Kolhinen, P. Karvonen, I.D. Moore, S. Rahaman, J. Rissanen, A. Saastamoinen, J.C. Thomas.
Precision Half-Life and Q-Value Measurement of the Super-Allowed Beta Emitter $(30)S$.
European Physical Journal A **47** (2011).
110. S.J. Steer, Zs. Podolyak, S. Pietri, M. Gorska, H. Grawe, K.H. Maier, P. H. Regan, D. Rudolph, A. B. Garnsworthy, R. Hoischen, J. Gerl, H.J. Wollersheim, F. Becker, P. Bednarczyk, L. Cáceres, P. Doornenbal, H. Geissel, J. Grebosz, A. Kelic, I. Kojouharov, N. Kurz, F. Montes, W. Prokopowicz, T.

- Saito, H. Schaner, S. Tachenov, A. Heinz, M. Pfützner, T. Kurtukian-Nieto, G. Benzoni, A. Jungclaus, D. Balabanski, M. Bowry, C. Brandau, A. Brown, A. M. Bruce, W. N. Catford, I. J. Cullen, Zs. Dombradi, E. Estevez, W. Gellately, G. Ilie, J. Jolie, G. A. Jones, M. Kmiecik, F. G. Kondev, R. Krücken, S. Lalkovski, Z. Liu, A. Maj, S. Myalski, S. Schwertel, T. Shizuma, P. M. Walker, E. Werner-Malento, and O. Wieland.
Isomeric States Observed in Heavy Neutron-Rich Nuclei Populated in the Fragmentation of a ^{208}Pb Beam.
Physical Review C **84**, 044313 (2011).
111. A. Tassadit, D. Macías, J.A. Sánchez-Gil, P.-M. Adam, R. Rodríguez-Oliveros.
Metal Nanostars: Stochastic Optimization of Resonant Scattering Properties.
Superlattices & Microstructures **49**, 288 (2011).
112. E. Tengborn, A. M. Moro, T. Nilsson, M. Alcorta, M. J. G. Borge, J. Cederkall, C. Diget, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, J. Gomez-Camacho, H. B. Jeppesen, H. T. Johansson, B. Jonson, O. S. Kirsebom, H. H. Knudsen, M. Madurga, G. Nyman, A. Richter, K. Riisager, G. Schrieder, O. Tengblad, N. Timofeyuk, M. Turrion, D. Voulot, F. Wenander.
The $(8)\text{Li} + (2)\text{H}$ Reaction Studied in Inverse Kinematics at 3.15 MeV/Nucleon Using the REX-ISOLDE Post-Accelerator.
Physical Review C **84**, 064616 (2011).
113. J. Walker, A. Jungclaus, J. Leske, K.-H. Speidel, A. Ekström, P. Boutachkov, J. Cederkäll, P. Doornenbal, J. Gerl, R. Gernhäuser, N. Goel, M. Gorska, I. Kojouharov, P. Maier-Komor, V. Modamio, F. Naqvi, N. Pietralla, S. Pietri, W. Prokopowicz, H. Schaffner, R. Schwengner, and H.-J. Wollersheim.
Magnetic Moments of the First Excited 2^+ States in the Semi-Magic $^{112,114,116,122,124}\text{Sn}$ Isotopes.
Physical Review C **84**, 014319 (2011).
114. Z. M. Wang, R. Chapman, F. Haas, X. Liang, F. Azaiez, B. Behera, M. Burns, E. Caurier, L. Corradi, D. Curien, A.N. Deacon, Zs. Dombradi, E. Farnea, E. Fioretto, A. Gadea, A. Hodsdon, F. Ibrahim, A. Jungclaus, K. Keyes, V. Kumar, A. Latina, S. Lunardi, N. Marginean, G. Montagnoli, D. Napoli, F. Nowacki, J. Ollier, D. O'Donnell, A. Papenberg, G. Pollarolo, M.-D. Salsac, F. Scarlassara, J.F. Smith, K.M. Spohr, M. Stanoiu, A.M. Stefanini, S. Szilner, M. Trotta, and D. Verney.
Collectivity in ^{41}S
Physical Review C **83**, 061304(R) (2011).
115. F. Zocca, M. A. Fraser, E. Bravin, M. Pasini, D. Voulot, F. Wenander.
Development of a Silicon Detector Monitor for the HIE-ISOLDE Superconducting Upgrade of the REX-ISOLDE Heavy-Ion Linac.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment **672**, 21 (2012).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MOLECULAR / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

116. E. del Puerto, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos, R.F. Aroca.
Plasmon Enhanced Spectroscopy of $N-N'$ -Dialkylquinacridones Used as Co-Dopants in OLEDs.
Journal of Physical Chemistry C, **115**, 16838 (2011).
117. E. del Puerto, S. Sanchez-Cortes, J.V. García-Ramos, C. Domingo.
Solution SERS of an Insoluble Synthetic Organic Pigment-Quinacridone Quinone-Employing Calixarenes as Dispersive Cavitands Controlled Localization of Interacting Bosons in a Disordered Optical Lattice.
Chemical Communications **47**, 1854 (2011).
118. L. Guerrini, E. Lopez-Tobar, J.V. Garcia-Ramos, C. Domingo, S. Sanchez-Cortes.
New Insights on the AuCore/Ptshell Nanoparticle Structure in the Sub-Monolayer Range: SERS as a Surface Analyzing Tool.
Chemical Communications **47**, 3174 (2011).
119. R. de Llanos, S. Sanchez-Cortes, C. Domingo, J.V. García-Ramos, P. Sevilla.
Surface Plasmon Effects on the Binding of Antitumoral Drug Emodin to Bovine Serum Albumin.
Journal of Physical Chemistry C **115**, 12419 (2011).

PROCEEDINGS ISI / ISI PROCEEDINGS

120. B. Cederwall, F. Ghazi Moradi, T. Back, A. Johnson, J. Blomqvist, E. Clement, G. de France, R. Wadsworth, K. Andgren, K. Lagergren, A. Dijon, G. Jaworski, R. Liotta, C. Qi, B.M. Nyako, J. Nyberg, M. Palacz, H. Al-Azri, A. Algora, G. de Angelis, A. Atac, S. Bhattacharyya, T. Brock, J.R. Brown, P. Davies, A. Di Nitto, Zs. Dombradi, A. Gadea, J. Gal, B. Hadinia, F. Johnston-Theasby, P. Joshi, K. Juhasz, R. Julin, A. Jungclaus, G. Kalinka, S.O. Kara, A. Khaplanov, J. Kownacki, G. La Rana, S.M. Lenzi, J. Molnar, R. Moro, D.R. Napoli, B.S. Nara Singh, A. Persson, F. Recchia, M. Sandzelius, J.-N. Scheurer, G. Sletten, D. Sohler, P.-A. Soderstrom, M.J. Taylor, J. Timar, J.J. Valiente-Dobon, E. Vardaci, S. Williams.
Evidence for a Spin-Aligned Neutron-Proton Paired Phase from the Level Structure of ^{92}Pd .
Nature **469**, 68 (2011).
121. M. Cubero, J. P. Fernández-García, J. A. Lay, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, D. G. Diget, B. Fulton, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad and P. Walden..
Elastic Scattering of ^9Li on ^{208}Pb at Energies around the Coulomb Barrier.
AIP Conference Proceedings **1377**, 338 (2011).
122. A. Jungclaus, J. Walker, J. Leske, K.-H. Speidel, A. E. Stuchbery, M. East, P. Boutachkov, J. Cederkall, P. Doornenbal, J. L. Egido, A. Ekstrom, J. Gerl, R. Gernhäuser, N. Goel, M. Górska, I. Kojouharov, P. Maier-Komor, V. Modamio, F. Naqvi, N. Pietralla, S. Pietri, W. Prokopowicz, H. Schaffner, R. Schwengner, and H.-J. Wollersheim.
New Lifetime Measurements in the Stable Semimagic Sn Isotopes Using the Doppler-Shift Attenuation Technique.
Journal of Physics Conference Series **312**, 092033 (2011).
123. V. Scuderi, A. Di Pietro, L. Acosta, F. Amorini, M.J.G. Borge, P. Figuera, M. Fisichella, L.M. Fraile, J. Gomez-Camacho, H. Jeppesen, M. Lattuada, I. Martel, M. Milin, A. Musumarra, M. Papa, M.G. Pellegriti, F. Perez-Bernal, R. Raabe, G. Randisi, F. Rizzo, D. Santonocito, G. Scalia, O. Tengblad, D. Torresi, A.M. Vidal, M. Zadro.
Structure Effects in the Reactions $(9,10,11)\text{Be}+(64)\text{Zn}$ at the Coulomb Barrier.
Journal of Physics: Conference Series **267**, 012012 (2011).
124. E. Nácher, J. L. Taín, B. Rubio, A. Algora, L. Batist, J. A. Briz, D. Cano-Ott, J. Döring, M. E. Estévez Aguado, A. Gadea, M. Gierlik, Z. Janas, I. Mukha, C. Plettner, and E. Roeckl.
Beta Delayed Alpha Emission from the Neutron Deficient Rare Earth Isotopes ^{152}Tm and ^{150}Ho .
AIP Conference Proceedings **1409**, 181 (2011).
125. O. Tengblad, M. Alcorta, M.J.G Borge, M. Cubero, M. Madurga, A. Perea, H.O.U Fynbo, K. Riisager, O. Kirsebom, S. Hyldegaard, B. Jonson, G. Nyman, T. Nilsson, D.G. Diget, and B. Fulton.
C Formation: A Classical Quest in New Light.
AIP Conference Proceedings **1377**, 270 (2011)
126. O. Tengblad, T. Nilsson, M. J. G. Borge, J. A. Briz, M. Carmona-Gallardo, C. Cruz, V. Gugliermi, E. Nácher, A. Perea, J. Sanchez del Rio, M. Turrion Nieves, H. T. Johansson, J. Bergström, E. Blomberg, A. Bülling, E. Gallneby, J. Hagdahl, L. Jansson, K. Jareteg, R. Masgren, M. Nordström, G. Risting, S. Shojaee, and H. Wittler.
Phoswich Scintillator for Proton and Gamma Radiation of High Energy.
AIP Conference Proceedings **1409**, 141 (2011).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

127. M. Balci, N. Uras-Aytemiz, P.C. Gómez, and R. Escribano.
Proton Transfer and Autoionization in $\text{HNO}_3\text{-HCl-(H}_2\text{O)}_n$ Particles.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 18145 (2011).
128. P. Baloh, H. Grothe, K. Whitmore, S.F. Parker, B. Martín Llorente, and R. Escribano.
Spectroscopic Investigation of Nitric Acid Monohydrate.
Molecular Physics **109**, 2083 (2011).

129. J. Bernard, M. Seidl, I. Kohl, K.R. Liedl, E. Mayer, O. Gálvez, H. Grothe, and T. Loerting.
Spectroscopic Observation of Gas-Phase Carbonic Acid Isolated in Matrix.
Angewandte Chemie International Edition. **50**, 1939 (2011).
130. S. Braungardt, M. Rodríguez, A. Sen (De), U. Sen, M. Lewenstein.
Atom Counting in Expanding Ultracold Clouds.
Physical Review A **84**, 043635 (2011).
131. S. Braungardt, M. Rodríguez, A. Sen, U. Sen, R. J. Glauber, and M. Lewenstein.
Counting of Fermions and Spins in Strongly Correlated Systems in and out of Thermal Equilibrium.
Physical Review A **83**, 013601 (2011).
132. E. Carrasco, M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro, and V. J. Herrero.
Neutral and Ion Chemistry in Low Pressure DC Plasmas of H_2/N_2 Mixtures: Routes for the Efficient Production of NH_3 and NH_4^+ .
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 19561 (2011).
133. L.H. Coudert, L.F. Pacios, and J. Ortigoso.
Rotation-Induced Breakdown of Torsional Quantum Control.
Physical Review Letters. **107**, 113004 (2011).
134. M. Cueto, M. Sanz, M. Oujja, F. Gamez, B. Martínez-Haya, M. Castillejo.
Platinum Nanoparticles Prepared by Laser Ablation in Aqueous Solutions: Fabrication and Application to Laser Desorption Ionization.
Journal Physical Chemistry C **115**, 22217 (2011).
135. O. Gálvez, B. Maté, V.J. Herrero, and R. Escribano.
HDO Infrared Detection Sensitivity and D/H Isotopic Exchange in Amorphous and Crystalline Ice.
Astrophysical Journal **738**, 133 (2011).
136. R.A. Ganeev, C. Hutchison T. Siegel, M. E. López-Arias, A. Zair, and J.P. Marangos.
High Order Armonic Generation from Metal Plasmas Using 1 kHz Laser Pulses.
Journal of Modern Optics **58**, 819 (2011).
137. A. García-Vela, R. de Nalda, J. Dura, J. González-Vázquez, L. Banares.
A 4D Wave Packet Study of the $CH(3)I$ Photodissociation in the A-Band. Comparison with Femtosecond Velocity Map Imaging Experiments.
Journal of Chemical Physics **135**, 154306 (2011).
138. M.E. González-Benito, F. Pérez-García, G. Tejada, and C. Gómez-Campo.
Effect of the Gaseous Environment and Water Content on Seed Viability of Four Brassicaceae Species after 36 Years Storage.
Seed Science and Technology **39**, 443 (2011).
139. P.G. Jambrina, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, and F.J. Aoiz
Can Quasicalssical Trajectory Calculations Reproduce i.e. Extreme Kinetic Isotope Effect Observed in the Muonic Isotopologues of the $H+H_2$ Reactions?
Journal of Chemical Physics **135**, 034310 (2011).
140. M. Jiménez-Redondo, E. Carrasco, V.J. Herrero, and I. Tanarro.
Isotopic Exchange Processes in Cold Plasmas of H_2/D_2 Mixtures.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 9655 (2011).
141. C. Kreisbeck, T. Kramer, M. Rodríguez, B. Hein.
High-Performance Solution of Hierarchical Equations of Motion for Studying Energy Transfer in Light-Harvesting Complexes.
Journal of Chemical Theory and Computation, **7**, 2166 (2011).
142. M. Kuehnel, J. M. Fernández, G. Tejada, A. Kalinin, S. Montero, R.E. Grisenti.
Time-Resolved Study of Crystallization in Deeply Cooled Liquid Para-Hydrogen.

- Physical Review Letters **106**, 245301 (2011).
143. G. Di Lonardo, L. Fusina, A. Baldan, R. Z. Martínez, and D. Bermejo.
High Resolution Infrared and Raman Spectroscopy of ν_2 and Associated Combination and Hot Bands of $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$.
Molecular Physics **109**, 2533 (2011).
144. R.Z. Martínez, J.L. Doménech, D. Bermejo, G. Di Lonardo, and L. Fusina.
Communication: Observation of Homonuclear Propensity in Collisional Relaxation of the $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$ ($\nu_2=1$) Isotopologue of Acetylene by Stimulated Raman Spectroscopy.
Journal of Chemical Physics **134**, 231102 (2011).
145. B. Maté, Y. Rodríguez-Lazcano, Ó. Gálvez, I. Tanarro and R. Escribano.
An Infrared Study of Solid Glycine in Environments of Astrophysical Relevance.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 12268 (2011).
146. E. Matykina, J.M. Hernandez-Lopez, A. Conde, C. Domingo, J.J. Damborenea, M.A. Arenas.
Morphologies of Nanostructured TiO₂ Doped with F on Ti-6Al-4V Alloy.
Electrochimica Acta **56**, 2221 (2011).
147. N. Moazzen-Ahmadi, R. Z. Martínez, and D. Bermejo,
The ν_5 Band of $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CH}_3$: High Resolution Stimulated Raman Spectrum and Global Three Band Analysis.
Journal of Molecular Spectroscopy **269**, 151 (2011).
148. M.A. Moreno, O. Gálvez, B. Mate, V.J. Herrero, and R. Escribano.
Formate Ion: Structure and Spectroscopic Properties.
Journal of Physical Chemistry A **115**, 70 (2011).
149. D. Muñoz-Martin, J.M. Fernandez-Navarro, J. Gonzalo, G. Jose, A. Jha, J.L.G. Fierro, C. Domingo, J. Garcia-Lopez.
Structural and Optical Properties of Tellurite Thin Film Glasses Deposited by Pulsed Laser Deposition.
Thin Solid Films **520**, 131 (2011).
150. D. Muñoz-Martin, A. Ruiz de la Cruz, J. M. Fernandez-Navarro, J. Solis, J. Gonzalo, C. Domingo.
Structural Origin of the Nonlinear Optical Properties of Lead Niobium Germanate Film Glasses.
Journal of Applied Physics **110**, 023522 (2011).
151. R. de Nalda, J. Dura, J. González-Vázquez, V. Lorient, L. Banares.
The Primary Step in the Ultrafast Photodissociation of the Methyl Iodide Dimer
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 13295 (2011).
152. R. de Nalda, M. López-Arias, M. Sanz, M. Oujja, M. Castillejo.
Harmonic Generation in Ablation Plasmas of Wide Bandgap Semiconductors.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 10755 (2011).
153. L.F. Pacios, P. C. Gómez and O. Gálvez.
Ab Initio Study of Hydroxyl Torsional Barriers and Molecular Properties of Mono- and Di-Iodotyrosine.
The Journal of Physical Chemistry A **115**, 12616 (2011).
154. J. Pérez-Ríos, G. Tejeda, J.M. Fernández, M.I. Hernández, S. Montero.
Inelastic Collisions in Molecular Oxygen at Low Temperature ($4 < T < 34$ K). Close-Coupling Calculations Versus Experiment.
Journal of Chemical Physics **134**, 174307 (2011).
155. N. Prieto, M. Gay, S. Vidal, O. Aagaard, J.A de Saja, M.L. Rodríguez-Mendez.
Analysis of the Influence of the Type of Closure in the Organoleptic Characteristics of a Red Wine by Using an Electronic Panel.
Food Chemistry **129**, 589 (2011).

156. L. Rubio-Lago, G.A. Amaral, A. N. Oldani, J. D. Rodríguez, M. G. González, G. A. Pino, and L. Bañares.
Photodissociation of Pyrrole-Ammonia Clusters by Velocity Map Imaging: Mechanism for the H-Atom Transfer Reaction.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 1082 (2011).
157. L. Rubio-Lago, J. D. Rodríguez, A. García Vela, M. G. González, G. A. Amaral, and L. Bañares.
A Slice Imaging and Multisurface Wave Packet Study of the Photodissociation of CH₃I at 304 nm.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 81086 (2011).
158. M. Sanz, M. López-Arias, J.F. Marco, R. de Nalda, S. Amoruso, G. Ausanio, S. Lettieri, R. Bruzzese, X. Wang, M. Castillejo.
Ultrafast Laser Ablation and Deposition of Wide Band Gap Semiconductors.
Journal of Physical Chemistry C **115**, 3203 (2011)
159. M. Sanz, M. López-Arias, E. Rebollar, R. de Nalda, M. Castillejo.
Laser Ablation and Deposition of Wide Bandgap Semiconductors: Plasma and Nanostructure of Deposits Diagnosis.
Journal of Nanoparticle Research **13**, 6621 (2011)
160. I. Tanarro and V.J. Herrero.
Large Effects of Small Pressure Changes in the Kinetics of Low Pressure Glow Discharges.
Plasma Sources Science and Technology **20**, 024006 (2011).
161. I. Tanarro, V. J. Herrero, E. Carrasco and M. Jiménez-Redondo.
Cold Plasma Chemistry and Diagnostics.
Vacuum **85**, 1120 (2011).
162. F. Thibault, R.Z. Martínez, D. Bermejo, and L. Gómez.
Collisional Line Widths of Autoperperturbed N₂: Measurements and Quantum Calculations.
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **112**, 2542 (2011).

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

163. E. Arias-Palomo, A. Yamashita, I.S. Fernández, R. Núñez-Ramírez, Y. Bamba, N. Izumi, S. Ohno and O. Llorca.
The Nonsense-Mediated mRNA Decay SMG-1 Kinase is Regulated by Large-Scale Conformational Changes Controlled by SMG-8.
Genes and Development **25**, 153 (2011).
164. M^a J. Capitán, R. Otero, J. Álvarez, R. Miranda.
Growth of Textures Adenine Thin Films to Exhibit only Chiral Faces.
Chemphyschem **12**, 1276 (2011).
165. V. Cruz, J. Ramos, and J. Martínez-Salazar
Water-Mediated Conformations of the Alanine Dipeptide as Revealed by Distributed Umbrella Sampling Simulations, Quantum Mechanics Based-Calculations and Experimental Data.
The Journal of Physical Chemistry B **115**, 4880 (2011).
166. A. Flores, F.J. Baltá Calleja, G. Di Marco, S. Sturniolo, M. Pieruccini.
Recrystallization Processes in Cold-Crystallized Poly(ethylene Terephthalate): Interplay between Structure Evolution and Conformational Relaxation.
Polymer **52**, 3155 (2011).
167. M. Hernández, M.A. López-Manchado, A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra.
Effects of Strain Induced Crystallization on the Segmental Dynamics of Vulcanized Natural Rubber.
Macromolecules **44**, 6574 (2011).
168. A. Linares, J.C. Canalda, M.E. Cagliao, T.A. Ezquerra.

- Conducting Nanocomposites Based on Polyamide 66 and Carbon Nanofibers Prepared by Cryogenic Grinding.*
Composites Science and Technology **71**, 1348 (2011).
169. S. Martín, J.F. Vega, M.T. Expósito, A. Flores and J. Martínez-Salazar.
A Three-Phase Microstructural Model to Explain the Mechanical Relaxations of Branched Polyethylene: A DSC, WAXD and DMTA Combined Study.
Colloid and Polymer Science **289**, 257 (2011).
170. R. Matesanz, J. Rodríguez-Salarichs, B. Pera, A. Canales, J.M. Andreu, J. Jiménez-Barbero, W. Bras, A. Nogales, W.S. Fang, J.F. Díaz.
Modulation of Microtubule Interprotofilament Interactions by Modified Taxanes.
Biophysical Journal **101**, 2970 (2011).
(Cover Picture of Biophysical Journal 2011, Dec 21.)
171. M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, O. Llorca, M. Quesada-Pérez, A. Martín-Molina, E. Aicart, E. Junquera.
Gene Vectors Based on DOEPC/DOPE Mixed Cationic Liposomes: A Physicochemical Study.
Soft Matter **7**, 5991 (2011).
172. R. Núñez-Ramírez, S. Klinge, L. Suguet, R. Melero, M.A. Recuero-Checa, M. Kilkenny, R.L. Perera, B. García-Alvarez, R.J. Hall, E. Nogales, L. Pellegrini, and O. Llorca.
Flexible Tethering of Primase and DNA Pol Alpha in the Eukaryotic Primosome.
Nucleic Acid Research **39**, 8187 (2011).
173. J. Ramos, V.L. Cruz, J. Martínez de Salazar, N.E. Campillo, and J.A. Páez.
Dissimilar Interaction of CB1/CB2 with Lipid Bilayers are Revealed by Molecular Dynamics Simulation.
Physical Chemistry Chemical Physics **13**, 3660 (2011).
174. J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
Computer Modelling of the Crystallization Process of Single-Chain Ethylene/1-Hexene Copolymers from Dilute Solutions.
Journal of Polymer Science: Polymer Physics **49**, 421 (2011).
175. E. Rebolgar, S. Pérez, J.J. Hernández, I. Martín-Fabiani, D.R. Rueda, T.A. Ezquerro, M. Castillejo.
Assessment and Formation Mechanism of Laser-Induced Periodic Surface Structures on Polymer Spin-Coated Films in Real and Reciprocal Space.
Langmuir **27**, 5596 (2011).
176. N. Robledo, J.F. Vega, J. Nieto and J. Martínez-Salazar.
The Role of the Interface in Melt Linear Viscoelastic Properties of LLDPE/LDPE Blends: Effects of the Molecular Architecture of the Dispersed Phase.
Journal of Applied Polymer Science **119**, 3217 (2011).
177. M. E. Romero-Guzmán, O. Flores, A. Flores, A. Romo-Urbe, B. Alvarado-Tenorio, B. Campillo.
Cold-Drawn Induced Microstructure in PVC-Bentonite Composites.
Polymers for Advanced Technologies **22**, 836 (2011).
178. M. Rubio, R. Hernández, A. Nogales, A. Roig, D. López.
Structure of a Spin-Crossover Fe(II)-1,2,4-Triazole Polymer Complex Dispersed in an Isotactic Polystyrene Matrix.
European Polymer Journal **47**, 52 (2011).
179. A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerro.
From Hard to Soft Confinement in a Symmetric Block Copolymer: Local and Segmental Dynamics.
Soft Matter **7**, 6477 (2011).
180. A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerro, W. Häussler, M. Soccio, N. Lotti, and A. Munari.
Homogeneous Dynamics within Inhomogeneous Environment in Semicrystalline Polymers.
Macromolecules **44**, 8124 (2011).

- 181.A. Sanz, A. Nogales, I. Puente-Orench, M. Jimenez-Ruiz, T.A. Ezquerra. *Detection of Early Stage Precursor During Formation of Plastic Crystal Ethanol from the Supercooled Liquid State: A Simultaneous Dielectric Spectroscopy with Neutron Diffraction Study.* Physical Review Letters **107**, 025502 (2011).
- 182.A. Sanz, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, A. Nogales. *Disorder-Order Transition and Nanostructure Control in a Polystyrene-b-Poly(ethyl Methacrylate) DiBlock Copolymer.* Journal of Nanostructured Polymers and Nanocomposites **7**, 10 (2011).
183. A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Zenker, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda, A. Nogales, T.A. Ezquerra. *Preparation and Characterization of Nanocomposites Based on COOH Functionalized Multi-Walled Carbon Nanotubes and on Poly(Trimethylene) Terephthalate.* Express Polymer Letters **5**, 977 (2011).
- 184.J.F. Vega, M.T. Expósito, J. Martínez-Salazar, M. Lobón-Poo, J. Osío-Barcina, and A. García-Martínez. *Molecular Architecture and Linear Viscoelasticity of Homogeneous Ethylene/Styrene Copolymers.* Rheologica Acta **50**, 207 (2011).
- 185.J.F. Vega, M.T. Expósito, J. Otegui, and J. Martínez-Salazar. *Eliminating Sharkskin Distortion in Polyethylene Extrusion via a Molecular Route.* Journal of Rheology **55**, 855 (2011).
- 186.E. Vicente-Alique, R. Núñez-Ramírez, J.F. Vega, P. Hu, and J. Martínez-Salazar. *Size and Conformational Features of ErbB2 and ErbB3 Receptors: a TEM and DLS Comparative Study.* European Biophysical Journal **40**, 835 (2011).

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. Luis J. Garay
Pilares e incertidumbres: Agujeros negros.
Revista del IAA **33**, 22 (2011).
2. J. Dukelsky, C. Esebbag, P. Schuck, and T. Suzuki
Comment on "Fermi-Bose Mixtures near Broad Interspecies Feshbach. Resonances".
Physical Review Letters **106**, 129601 (2011).

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

1. H. Alvarez-Pol, V. Avdeichikov, M. Bendel, J. Benlliure, E. Casarejos, J. Cederkall, D.Cortina-Gil, C. Cruz, P. Díaz, D. DiJulio, I. Durán, M. Gascon, R. Gernhäuser, P. Golubev, B. Jakobsson, H.T. Johansson, R. Krücken, T. Le Bleis, M. Mostazo, E. Nácher, T. Nilsson, C. Parrilla, A. Perea, J. Sánchez del Rio, O. Tengblad, R. Thies, J.A. Vilán, M. Winkel, P. Yáñez, and the R3B collaboration.
Progress in the Design of the CALIFA/R3B Detector.
GSI Scientific Report 2010-GSI Report 2011-1.
2. S. Martínez-Ramírez, L. Fernández-Carrasco.
Estudio de los cementos anhidros e hidratados a través de espectroscopia Raman.
Cemento y Hormigón **1**, 4 (2011).

3. O. S. Kirsebom, S. Hyldegaard, M. Alcorta, M. J. G. Borge, J. Buscher, T. Eronen, S. Fox, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, H. Hultgren, A. Jokinen, B. Jonson, A. Kankainen, P. Karvonen, T. Kessler, A. Laird, M. Madurga, I. Moore, G. Nyman, H. Penttila, S. Rahaman, M. Reponen, K. Riisager, T. Roger, J. Ronkainen, A. Saastamoinen, O. Tengblad, J. Äystö.
Erratum: Precise and Accurate Determination of the (8)B Decay Spectrum [Phys. Rev. C 83, 065802 (2011)]
Physical Review C **84**, 049902 (2011).
4. M. Cubero, J. P. Fernández-García, J. A. Lay, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, D. G. Diget, B. Fulton, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotton, O. Tengblad and P. Walden.
Elastic Scattering of ^9Li on ^{208}Pb at Energies around the Coulomb Barrier.
5th International Conference FUSION11.
EPJ Web of Conferences **17**, 16002(2011).
5. V.V. Parkar, G. Marquinez, I. Martel, A.M. Sánchez-Benítez, L. Acosta, R. Berjillos, J. Dueñas, J.L. Flores, J.P. Bolivar, A. Padilla, M.A.G. Alvarez, D. Beaumel, M.J.G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J.P. Fernandez Garcia, B. Fernández Martínez, J. Gomez Camacho, N. Keeley, J.A. Labrador, M. Marquis, M. Mazzocco, A. Pakou, N. Patronis, V. Pseudo, D. Pierroutsakou, R. Raabe, K. Rusek, R. Silvestri, L. Standylo, I. Strojek, N. Soic, O. Tengblad, R. Wolski, and A.H. Ziad.
Fusion of ^8He with ^{206}Pb around Coulomb Barrier Energies.
5th International Conference FUSION11.
EPJ Web of Conferences **17**, 16009 (2011).

6.2.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

6. Niederberger, S. Braungardt, U. Ebling, T. Grass, P. Hauke, A. Kubasiak, A. Zamora, R. Augusiak, O. Dutta, E. Szirmai, M. Ciappina, F. M. Cucchiatti, A. Eckardt, J. K. Korbicz, G. J. Lapeyre, G. Szirmai, L. Tagliacozzo, M. Rodríguez, P. Massignan, M. Lewenstein.
Theoretical Pathways towards Experimental Quantum Simulators.
Opt. Pura Apl. **44**, 333 (2011).
7. J. L. Doménech, R. Z. Martínez, Á. Ramos, and D. Bermejo.
CORRECTION TO *Direct Determination of State-to-State Rotational Energy Transfer Rate Constants via a Raman-Raman Double Resonance Technique: Ortho-Acetylene in $v_2=1$ at 155 K* [J. Chem. Phys. **132**, 154303 (2010)].
Journal of Chemical Physics **134**, 139902 (2011).

6.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

8. M. Domínguez-Díaz, A. Flores, R. Cruz-Silva, A. Romo-Uribe.
Kinetics of Crystallization of Biodegradable PHA Copolymers: A Combined X-Ray Scattering and Micro-Indentation Study.
Materials Research Society Proceedings Vol. 1301, mrsf10-1301, 11 (2011).
DOI: 10.1557/opl.2011.555

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

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

1. O. Moreno, J. M. Boillos, E. Moya de Guerra
Aspectos de estructura nuclear en la desintegración beta simple y doble de ^{76}Ge .
Libro de Actas de la XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física **I**, 143-144 (2011).
2. Moreno, E. Navarro, E. Moya de Guerra
Observables de violación de paridad en isótopos de Ba: aplicación a experimentos atómicos.

Libro de Actas de la XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física I, 219-220 (2011).

3. J.M. Udías, J.R. Vignote, M.V. Ivanov, R. Alvarez-Rodriguez.
A Systematic Study of Elastic Proton-Nucleus Scattering.
Proceedings of the 30th International Workshop on Nuclear Theory, Vol. 30
Heron Press, Sofia, Bulgaria.

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

4. M.V. Cañamares, S. Martínez-Ramírez, and S. Sánchez-Cortés.
Study of a 3th Generation Commercial Cement Superplasticizer by Spectroscopic Techniques: UV-Visible, Raman and SERS.
Proceedings of the 6th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archeology, p.121-122.
ISBN: 978-88-97162-20-9.
5. M. Perez-Mendez, J. Fayos, G. P. Blanch, and S. Sanchez-Cortes.
Biofunctionalization of Cholesteric Liquid-Crystal Helical Polymers.Nanocarriers.
Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, V. 11, p. 547-580, Edited by H. S. Nalwa ACS. American Scientific Publishers (<<http://www.aspbs.com/enn/>><http://www.aspbs.com/enn/>)
ISBN: 1-58883-160-4
6. F. Zocca, M. A. Fraser, M. Pasini E. Bravin, D. Voulot, F.Wenander.
Development of a Silicon Detector Monitor for the Superconducting Upgrade of the REX-ISOLDE Heavy-Ion linac at CERN.
Proceedings of 10th European Workshop on Beam Diagnostics and Instrumentation for Particle Accelerators (DIPAC2011), MOPD36.
ISSN: 2225-4633

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

7. T. de los Arcos and I. Tanarro.
Plasma, el cuarto estado de la materia.
Collection: “¿Que sabemos de?”, nº 21.
Editorials: CSIC – Catarata (2011).
ISBN: 978-84-00-09303-7 (CSIC), ISBN: 978-84-8319-594-9 (Catarata).
8. M. Castillejo, C. Domingo, S. Martínez, M. Oujja.
Láseres y Nanotecnologías para el Patrimonio Cultural (LANAPAC).
“Ciencia y Tecnología para la Conservación del Patrimonio Cultural”, M.A. Rogelio Candelera, C. Saiz Jimenez (Eds.), IRNAS-CSIC, Madrid 2011, ISBN.: 978-84-694-6137-2, pp. 27-30.
(Together with ENVYMED)
9. C. Domingo.
Técnicas de espectroscopía Raman aplicadas en Conservación.
“La Ciencia y el Arte III”, M. del Egido, D. Juanes (Eds.), IPCE, MCU, Madrid 2011, p 67-81.

6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

10. F.J. Baltá Calleja and A. Flores.
Hardness.
Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, 4th ed., DOI: 10.1002/0471440264. Pst 151, pub 2.
Wiley.Interscience, 2011.

6.4 TESIS DOCTORALES / Ph. D. THESES

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

Title: **Sistemas de Tres Cuerpos en el Continuo y Reacciones de Interés Astrofísico.**

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

Date: 4th of February 2011.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: **Raúl de Diego Martínez.**

Supervisor: **Eduardo Garrido Bellido.**

Title: **Estructura Nuclear y Reacciones en Sistemas de Tres Cuerpos.**

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

Date: 28th of February 2011.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: **Carolina Romero Redondo.**

Supervisor: **Eduardo Garrido Bellido.**

Title: **"Estudio de transiciones de fase cuánticas en modelos de dos niveles"**

University: Facultad de Física, Universidad de Sevilla.

Date: 21st of June 2011.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: **Pedro Pérez-Fernández.**

Supervisor: **Armando Relaño, Jorge Dukelsky and José M. Arias**

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

Title: **Magnetic moment measurements in stable semi-magic Sn isotopes.**

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

Date: 16th May 2011.

Mark: Sobresaliente "cum laude".

Candidate: **Jennifer Deborah Walker.**

Supervisor: **Andrea Jungclaus.**

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: **Complex Systems for Quantum Technologies.**

University: Instituto de Ciencias Fotónicas, Universidad Politécnica de Cataluña.

Date: 12th July 2011.

Mark: Sobresaliente cum laude.

Candidate: **Sibylle Braungardt.**

Supervisor: **Maciej Lewenstein and Mirta Rodríguez Pinilla.**

6.5 TESIS DE LICENCIATURA, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER

6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: **Unitariedad y unicidad en la cuantización de perturbaciones cosmológicas.**

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

Date: 26th of September 2011.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Mikel Fernández Méndez.**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán.**

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

Title: Calibración de detectores de Silicio para el estudio de emisión de protones retrasada por la desintegración β .

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

Date: 3rd October 2011.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Vicente Pesudo Fortes.**

Supervisor: **M^a José García Borge.**

Title: Núcleos exóticos y los límites de la línea de goteo de neutrones: Experimento s393 de la colaboración R3B y calibración en energías de Crystal Ball.

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

Date: 3rd October 2011.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Guillermo Ribeiro Jiménez.**

Supervisor: **Olof Tengblad.**

6.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: Procesos de intercambio isotópico en plasmas fríos de mezclas de H₂/D₂. Academic Work

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: 4th July 2011.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: **Miguel Jiménez Redondo.**

Supervisor: **Isabel Tanarro Onrubia.**

6.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: Propiedades viscoelásticas en estado fundido y estudio de los fenómenos de orientación en mezclas de poliolefinas.

University: Universidad Simón Bolívar, Caracas (Venezuela).

Date: 5th October 2011.

Mark: Excepcionalmente Bueno.

Candidate: **Grisel Zapino Guzmán.**

Supervisor: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Juan Francisco Vega Borrego.**

Title: Efecto de la estructura molecular en la respuesta viscoelástica de nanocompuestos polietileno/nanotubos de carbono.

University: Universidad Simón Bolívar, Caracas (Venezuela).

Date: 5th October 2011.

Mark: Excepcionalmente Bueno con Mención de Honor.

Candidate: **Yudith da Silva Caires.**

Supervisor: **Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Juan Francisco Vega Borrego.**

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO / DATA COMPARED TO EXPECTATIONS FROM THE STRATEGIC PLAN

	Expected 2007	2007	Expected 2008	2008	Expected 2009	2009	Expected2010	2010	Expected 2011	2011
Number of ISI publications	147	181	155	171	165	166	152	174	163	186
Number of non-ISI publications	13	31	14	46	14	29	-	28	-	18
Total stock of PhD fellowships and contracts	25	40	25	41	26	34	-	25	-	23
Stock of postdoc fellowships and contracts	15	15	16	22	18	18	-	22	-	23
Number of PhD Theses defended	5	10	6	5	7	11	7	8	7	5
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	25	49,2	28	46	30	43,6	33,8	41,4	34,8	63,5*

*Includes data of BSc courses.

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

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2010)
Nature	1	36.104
PhysicsReports-Review Section of Physics Letters	1	19.438
Genes & Development	1	12.889
Angewandte Chemie-International Edition	1	12.730
Advanced Materials	1	10.880
Nucleic Acid Research	1	7.836
Astrophysical Journal	1	6.063
Physical Review Letters	5	7.622
Journal of High Energy Physics	1	6.049
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	1	6.497
Analytical Chemistry	1	5.874
Chemical Communications	2	5.787
Physics Letters B	3	5.255
Physical Review D	6	4.964
Biophysical Journal	1	4.218
Soft Matter	2	4.457
Journal of Chemical Theory and Computation	1	5.138
Macromolecules	2	4.838
Physical Chemistry Chemical Physics	9	3.454
Journal of Physical Chemistry C	4	4.524
Analytica Chimica Acta	1	4.311
Langmuir	2	4.269
Nanoscale	1	4.109
Polymer	1	3.829
New Journal of Physics	1	3.849

Spectrochimica Acta B	2	3.552
Chemphyschem	1	3.340
Food Chemistry	1	3.458
Physical Review C	22	3.416
Physical Review B	3	3.774
Optics Express	1	3.753
Electrochimica Acta	1	3.650
Journal of Physical Chemistry B	1	3.603
Journal of Nanoparticle Research	1	3.253
Journal of Raman Spectroscopy	1	3.137
Journal of Rheology	1	3.117
Protein Engineering Design and Selection	1	3.023
Journal of Chemical Physics	5	2.921
Classical and Quantum Gravity	3	3.099
Composites Science and Technology	1	2.863
Journal of Physical Chemistry A	3	2.732
Food Hydrocolloids	1	2.659
Food Research International	1	2.416
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative	1	2.331
Physical Review A	5	2.861
Journal of Agricultural and Food Chemistry	1	2.816
Rheologica Acta	1	2.382
Physical Review E	1	2.352
Applied Clay Science	1	2.303
Progress in Organic Coatings	1	1.862
Journal of Statistical Mechanics-Theory and Experiments	1	1.822
Solid State Communications	2	1.981
Thin Solid Films	1	1.935
Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams	1	1.661
Journal of Molecular Spectroscopy	1	1.497
Journal of Polymer Science: Polymer Physics	1	1.300
Construction and Building Materials	1	1.366
Journal of Mathematical Chemistry	1	1.259
Analytical Methods	1	1.036
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment	5	1.142
Plasma Sources Science Technology	1	2.218
Vibrational Spectroscopy	1	2.083
Journal of Applied Physics	2	2.079
Colloid and Polymer Science	1	2.443
European Physical Journal A	4	2.592
Biopolymers	1	2.572
European Polymer Journal	1	2.518
European Biophysics Journal with Biophysics Letters	1	2.387
Foundations of Physics	1	0.972
Molecular Physics	2	1.743
Powder Technology	1	1.887
Polymers for Advanced Technologies	1	1.776
Journal of Molecular Structure	2	1.599
Express Polymer Letters	1	1.575
Cement and Concrete Composite	1	1.527
Journal of Non-Crystalline Solids	1	1.492

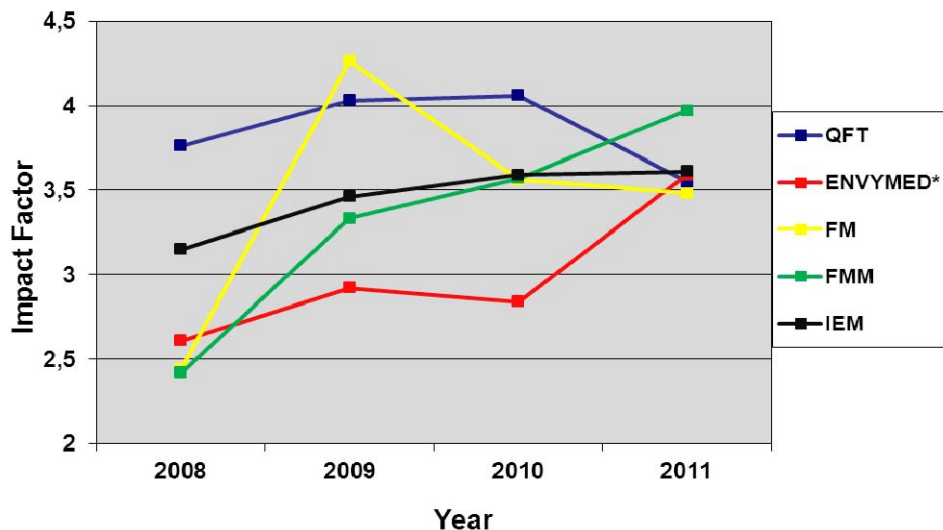
Journal of Applied Polymer Science	1	1.240
Superlattices Microstructures	1	1.096
Vacuum	1	1.051
Applied Radiation Isotopes	1	0.999
Journal of Modern Optics	1	0.988
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics	2	0.695
Low Temperature Physics	1	0.625
Few-Body Systems	6	0.622
Seed Science Technology	1	0.605
International Nuclear Physics Conference 2010 (INPC)	2	-
Journal of Physics Conference Series	11	-
Journal of Nanostructured Polymers and Nanocomposites	1	-
AIP Conference Proceedings	8	-
TOTAL:	186	Average Impact Factor:3,61

Number of Journals: 89

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

Department Key:

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



* El Dpto.de Espectroscopia Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos de los años 2008,2009 y 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componen:el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopia Vibracional y Procesos Multifotónicos/
The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the years 2008, 2009, and 2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		“Ramón y Cajal”		Other PostDocs		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1	-	-	6	2	3	1	4	2	-	1	20	7	27
ENVYMED	9	4	-	-	3	4	-	2	12	4	1	2	25	16	41
FM	10	3	1	1	1	2	-	-	1	1	2	2	15	9	24
FMM	6	6	-	-	2	1	1	1	4	2	2	1	15	11	26
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		10	-	10	10
IEM	32	14	1	1	12	9	4	4	21	9	5	16	75	53	128

¹“Authorized Stay” excluded

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

Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados /

Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 120

7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

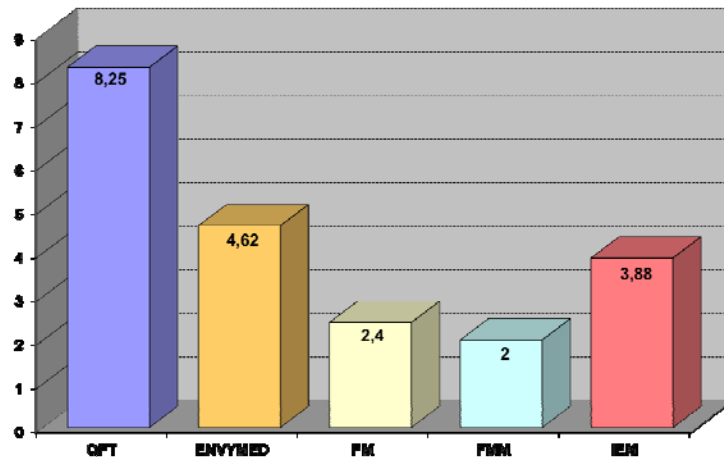
	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	63(+3) ¹	56(+4) ²	36	24	186
Other publications	5	8	5	2	20

¹In parenthesis, papers shared between the QFT and ENVYMED/FM Departments.

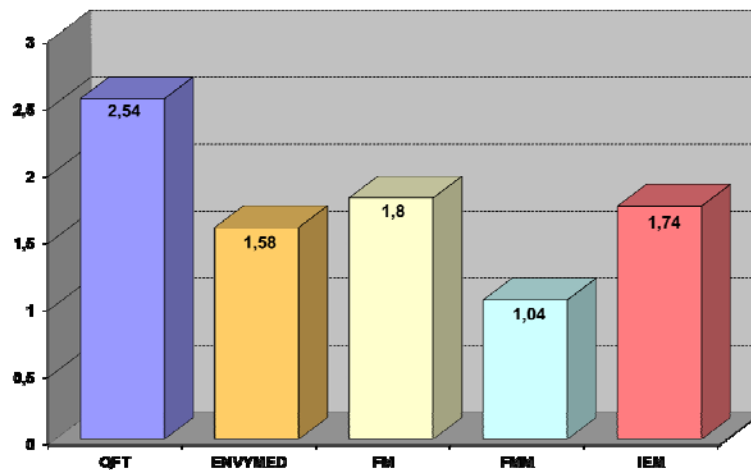
²In parenthesis, papers shared between the ENVYMED and FM Departments.

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS

- **Ratio por investigador senior (plantilla más “Ramón y Cajal”) / Ratioper senior researcher(staff plus“Ramón y Cajal”).**



- **Ratio por personal científico (sin incluir personal de apoyo) / Ratio per scientific personnel(excluding support staff).**



(See “Department Key” in section 7.3)

Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal científico en plantilla / Ratio of ISI publications of IEM per scientific staff researcher: 4,04.

ÍNDICE

INDEX

Introducción / Introduction	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	5
Dirección / Direction	6
Junta de Instituto / Institute Board.....	6
Claustro Científico / Scientific Staff	6
Departamentos de Investigación / Research Departments	7
Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	7
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	8
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	9
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	10
Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC	11
2A. Labor Investigadora	13
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	14
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y Medios Desordenados	20
2A.3 Dpto. de Física Molecular	33
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular	39
2B. Research Activities.....	47
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	48
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media SpectroscopyDept.	54
2B.3 Molecular Physics Dept.	66
2B.4 Macromolecular Physics Dept.	71
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	79
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	80
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	81
3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	84
3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	85
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation.....	89
4.1 Congresos y Reuniones Nacionales / National Congresses and Meetings	90
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry.....	90

4.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	90
4.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	91
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	91
4.2	Congresos y Reuniones Internacionales / International Congresses and Meetings.....	91
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	91
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	94
4.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	97
4.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	100
4.3	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	101
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	101
4.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	101
4.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	101
4.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	101
4.4	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Conferences.....	102
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	102
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	104
4.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	105
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	105
4.5	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	105
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	105
4.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	106
4.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	107
4.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	107
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	109
5.1	Docencia / Teaching	110
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	110
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	110
5.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	112
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	112
5.2	Cursos y Conferencias / Courses and Conferences	112
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	112
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	113

5.2.3	Dpto. de Física Molecular/Molecular Physics.....	114
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	114
5.3	Cursos, Congresos y Seminarios Organizados por el Instituto / Courses, Congresses, and Seminars Organized by the Institute.....	114
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	114
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	115
5.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	115
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics	116
5.4	Premios y Otros Méritos /Awards	117
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	117
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	117
5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	118
5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	119
5.5	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	120
5.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	120
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	121
5.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	121
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	122
5.6	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	122
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	122
5.7	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	124
5.7.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	124
5.7.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	124
5.7.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	125
5.7.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	125
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production	127
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	128
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	128
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	132
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	138
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	141
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	143
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	143

6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	143
6.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	144
6.2.5	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	144
6.3	Libros, Monografías y Publicaciones de <i>Proceedings</i> / Books, Proceedings, and Other Publications	144
6.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	144
6.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	145
6.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	145
6.3.4	Dpto. de Macromolecular/ Macromolecular Physics	145
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	146
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	146
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	146
6.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	146
6.5	Tesinas, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster / Graduate Diplomas and Master Theses	146
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	146
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	147
6.5.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	147
6.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/Macromolecular Physics.....	147
7	Tablas y Datos / Tables and Data	149
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan.....	150
7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals ...	150
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	152
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments.....	153
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	153
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments	154