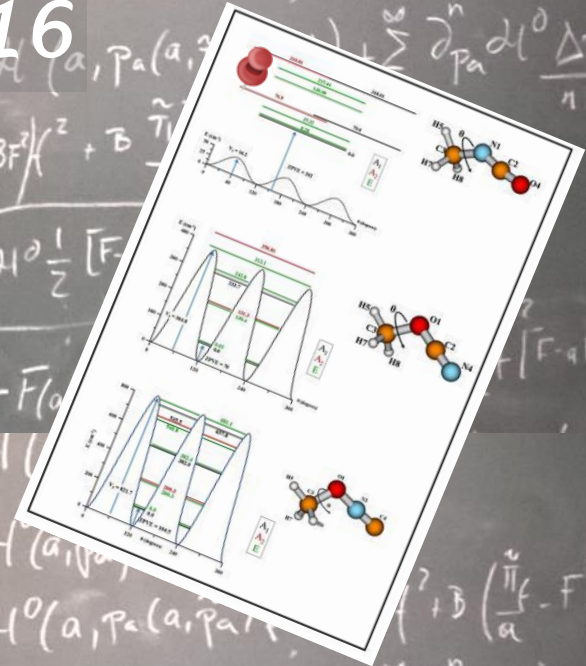
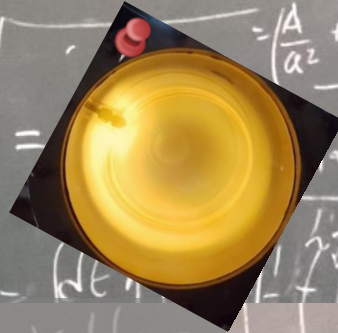
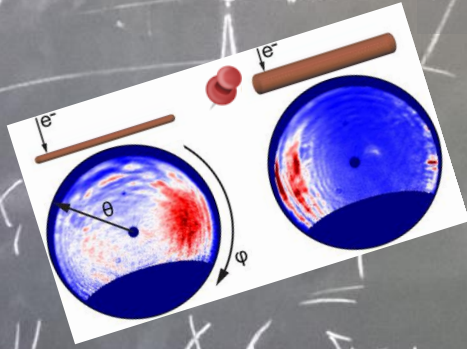


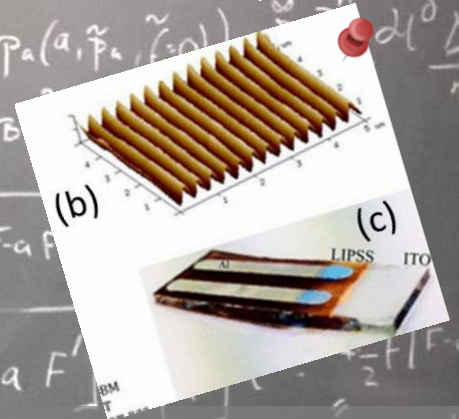
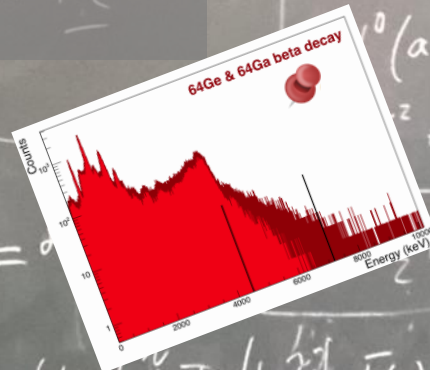
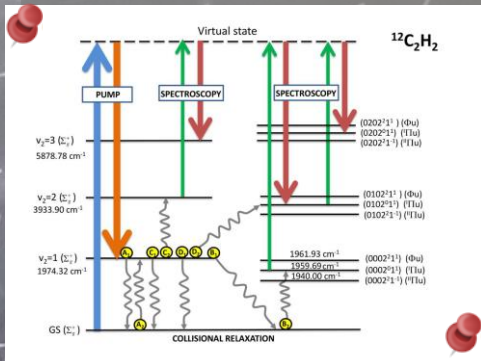
Mukhanov - Sasaki

Instituto de Estructura de la Materia

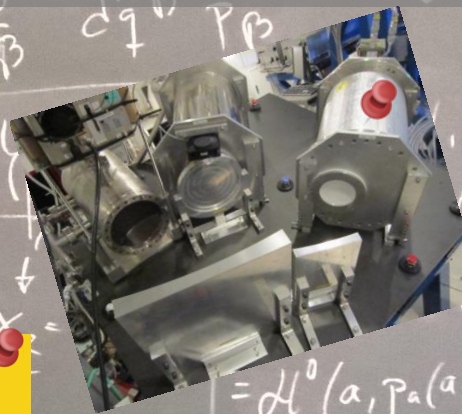
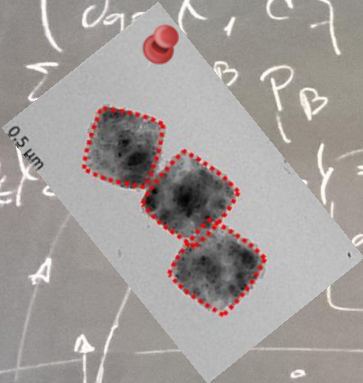
Memoria 2016



Consejo Superior de Investigaciones Científicas



ANNUAL REPORT 2016



INTRODUCCIÓN

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

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía en Nanoestructuras Metálicas o la Gravitación. Durante 2016, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Astrofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y en otras áreas relacionadas.

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

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

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

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

Esta actividad científica ha quedado plasmada durante 2016 en 159 publicaciones ISI.

INTRODUCTION

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

The IEM was founded in 1976 with the union of some researchers in Particle Physics, Molecular Physics, Quantum Chemistry and Crystalline Polymers. With the advent of new scientists and the changes experienced by some research topics, the scientific activities of IEM have included other areas such as Nuclear Physics, Spectroscopy of Metal Nanostructures and Gravitation. During 2016, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Astrophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry and other related fields.

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

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

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

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

This scientific activity, during 2016, has crystallized in 159 ISI publications.

CAPÍTULO 1

ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

+

CHAPTER 1

INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / DIRECTION

Director / Director: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Vicedirector / Assistant Director: Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Vicedirector / Assistant Director: Dr. José M. Fernández Sánchez
Gerente / Manager: D^a. Marta M^a Granja Perdices

JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD

Presidente / President: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Secretaria / Secretary: D^a. Marta M^a Granja Perdices

Vocales / Members:

Dr. José Carlos Canalda Cámara
 Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
 Dr. José M. Fernández Sánchez
 Prof. José González Carmona
 Dr. Rafael Molina Fernández
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez
 D. Miguel Ángel Moreno Alba
 Dr. Santiago Sánchez Cortés
 Dr. Juan Francisco Vega Borrego

CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF

Presidente / President: Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Secretario / Secretary: Dr. Rafael Molina Fernández

Personal Investigador / Scientific staff:

Dr. Fernando Ania García
 Dr. Jesús Fernando Barbero González
 Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera
 Prof. Dionisio Bermejo Plaza
 Dr. Carlos Cabrillo García
 Dr. Gianluca Calcagni
 Dra. M^a Vega Cañamares Arribas
 Dr. Pedro Carmona Hernández
 Dr. Víctor Cruz Cañas
 Dr. Luis Mariano Díaz Sol
 Dr. José Luis Doménech Martínez
 Prof. Jorge Dukelsky Bercovich
 Prof. Rafael Escribano Torres
 Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
 Dr. Ricardo Fernández Perea
 Dra. Araceli Flores Aguilar Amat
 Dr. José M. Fernández Sánchez
 Dr. Óscar Gálvez González
 Dra. M^a Cruz García Gutiérrez
 Prof. José Vicente García Ramos
 Dr. Eduardo Garrido Bellido
 Prof. José González Carmona
 Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga
 Dra. Andrea Jungclaus
 Dra. Amelia Linares Dos Santos
 Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana
 Dra. M^a del Sagrario Martínez Ramírez
 Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres
 Dra. Belén Maté Naya

Dra. Aurora Nogales Ruiz
 Dr. Juan Ortigoso Martínez
 Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
 Dr. Santiago Sánchez Cortés
 Dr. José Antonio Sánchez Gil
 Dr. Julio Francisco Santos Gómez
 Prof. Pedro Sarriguren Suquilbide
 Dra. M^a Luisa Senent Diez
 Dra. Isabel Tanarro Onrubia
 Dr. Vicente Timón Salinero
 Dr. Guzmán Tejeda Gala
 Prof. Olof E. I. Tengblad
 Dr. Juan Francisco Vega Borrego

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. José González Carmona

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Personal Científico / Research Staff:

Dr. Pedro Jorge Dukelsky Bercovich

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Pedro Sarriguren 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*

Dr. Gianluca Calcagni

Investigador Contratado RyC / *Tenure Track Contract R&C*

Dra. Rosa Domínguez Gómez

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

Dr. Luis Javier Garay Elizondo

Doctor Vinculado / *Adjoint Researcher*

Dra. Elvira Moya Valgañón de Guerra

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

D^a M^a Concepción Pulido de Torres

Titulado Superior Contratado / *University Graduate*

D^a. Samira Dalbouha

Becaria Predoctoral MAE-AECID (hasta 6 de agosto) / *PhD Fellowship MAE-AECIF (until 6th of August)*

D^a. Sara Cherifa Bennedjai

Autorización de Permanencia (del 5 de enero al 31 de marzo) / *Authorized Stay (from January 5th to March 31st)*

D. Enrique Benito Matías

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

Dra. Rahma Boussessi

Autorización de Permanencia (hasta 23 de septiembre) / *Authorized Stay (until 23rd of September)*

Dra. Laura Castelló Gomar

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

D^a. Beatriz Elizaga de Navascués

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

D. Dennis Hove

Autorización de Permanencia (desde 5 de septiembre) / *Authorized Stay (since 5th of September)*

D^a. Juliana Lumer

Autorización de Permanencia (del 8 de febrero al 29 de abril) / *Authorized Stay (from February 8th to April 29th)*

D. Juan Margalef Bentabol

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

Dr. Daniel Martín de Blas

Autorización de Permanencia (desde 1 de octubre) / *Authorized Stay (since 1st of October)*

Dr. Óscar Moreno Díaz

Autorización de Permanencia (hasta 11 de noviembre) / *Authorized Stay (until 11th of November)*

D^a Katherine Murphy

Autorización de Permanencia (del 30 de mayo al 13 de julio) / *Authorized Stay (from May 30th to July 13th)*

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Santiago Sánchez Cortés

Investigador Científico / *Research Scientist*

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Javier Bermejo Barrera

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Prof. José V. García Ramos

Profesor de Investigación (jubilado el 7 de diciembre) / *Research Professor (retired on December 7th)*

Prof. Olof Erik Tengblad

Profesor de Investigación / *Research Professor*

Dr. Carlos Cabrillo García

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dr. Pedro Carmona Hernández

Investigador Científico (jubilado el 13 de abril) / *Research Scientist (retired on April 13th)*

Dra. Andrea Jungclaus

Investigadora Científica / *Research Scientist*

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Investigador Científico / *Research Scientist*

Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dr. Luis Díaz Sol

Científico Titular (jubilado el 31 de julio) / *Tenured Scientist (retired on July 31st)*

Dr. Ricardo Fernández Perea

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Sagrario Martínez Ramírez

Científico Titular / *Tenured Scientist*

Dra. Marina Molina Santos

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

Dra. Paz Sevilla Sierra

Doctora Vinculada / *Adjoint Researcher*

D. Álvaro Fernández Martínez

Titulado Superior Contratado (desde 1 de diciembre) / *University Graduate (since 1st of December)*

D. Eduardo López Tobar

Titulado Superior Contratado (hasta 28 de febrero) / *University Graduate (until 28th of February)*

D^a. Irene Marroquín Alonso

Contrato Predoctoral FPI/ *Predoctoral Contract FPI*

D. Diego Romero Abujetas

Contrato Predoctoral FPU (desde 16 de septiembre) / *Predoctoral Contract FPU (since 16th of September)*

D. Víctor Vaquero Soto

Contrato Predoctoral FPI / *Predoctoral Contract FPI*

D^a Juana G. Calvillo Vázquez

Autorización de Permanencia (del 22 de junio al 31 de diciembre) / *Authorized Stay (from June 22th to December 31st)*

D^a. Silvia Dalla Marta

Autorización de Permanencia (hasta 30 de abril) / *Authorized Stay (until 30th of April)*

D^a Alba Espina García

Autorización de Permanencia (del 4 de abril al 10 de julio) / *Authorized Stay (from April 4th to July 10th)*

Dra. Adianez García Leis

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

D. Andrés Illana Sisón

Autorización de Permanencia (hasta 12 de febrero) / *Authorized Stay (until 12th of February)*

D^a Elizabeth Imbarack Candia

Autorización de Permanencia (del 15 de junio al 28 de octubre) / *Authorized Stay (from June 15th to October 28th)*

D. Alejandro Garzón Camacho

Autorización de Permanencia (del 15 de febrero al 6 de septiembre) / *Authorized Stay (from February 15th to September 6th)*

D. Miguel A. González Mandujano

Autorización de Permanencia (desde 5 de julio hasta 29 de septiembre) / *Authorized Stay (since 5th of July until 29th of September)*

D. Moisés Martín Garrido

Autorización de Permanencia / *Authorized Stay*

D. Fernando Peñaranda del Río

Autorización de Permanencia (del 13 de junio al 29 de julio) / *Authorized Stay (from June 13th to July 29th)*

D^a Klara Retko

Autorización de Permanencia (del 18 de enero al 17 de junio) / *Authorized Stay (from January 18th to June 17th)*

D. Rodrigo Sánchez González

Autorización de Permanencia (del 30 de mayo al 31 de julio) / *Authorized Stay (from May 30th to July 31st)*

D. Lorenzo Tinacci

Autorización de Permanencia (del 15 de abril al 15 de julio) / *Authorized Stay (from April 15th to July 15th)*

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. Enrique Nácher González	Técnico Superior Especializado de OPIS / <i>Specialized University Graduate OPIs</i>
D. Ángel Perea Martínez	Técnico Especialista de Grado Medio de OPIS / <i>Specialist Technician OPIs</i>
D ^a . Purificación Corchete Corchete	Ayudante de Investigación de OPIS/ <i>Research Assistant OPIs</i>

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

Dr. Juan Ortigoso Martínez	Científico Titular/ <i>Tenured Scientist</i>
----------------------------	--

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza	Profesor de Investigación / <i>Research Professor</i>
Prof. Rafael Escribano Torres	Profesor de Investigación / <i>Research Professor</i>
Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga	Profesor de Investigación / <i>Research Professor</i>
Prof. Salvador Montero Martín	Profesor de Investigación “ad honorem” / <i>Research Professor “ad honorem”</i>
Dr. José Luis Domenech Martínez	Investigador Científico / <i>Research Scientist</i>
Dr. José María Fernández Sánchez	Investigador Científico / <i>Research Scientist</i>
Dra. Isabel Tanarro Onrubia	Investigadora Científica / <i>Research Scientist</i>
Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dra. Belén Maté Naya	Científica Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dr. Julio Francisco Santos Gómez	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dr. Guzmán Tejada Gala	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dr. Vicente Timón Salinero	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dr. Óscar Gálvez González	Postdoctoral RyC (hasta 31 de marzo); Autorización de Permanencia (desde 1 de abril) / <i>Tenure Track Contract R&C (until 31 de marzo); Authorized Stay (since 1st of April)</i>
D. Miguel Jiménez Redondo	Titulado Superior Contratado (del 1 de marzo al 31 de julio) / <i>University Graduate (from March 1st to July 31st)</i>
D. Germán Molpeceres de Diego	Contrato Predoctoral FPI / <i>Predoctoral Contract FPI</i>
D ^a Nour El Houda Ben Siradj	Autorización de Permanencia (del 5 de enero al 20 de marzo) / <i>Authorized Stay (from January 5th to March 20th)</i>
D. Francisco Colmenero Ruiz	Autorización de Permanencia / <i>Authorized Stay</i>
D ^a . Teresa Cueto Senra	Autorización de Permanencia (hasta 29 de febrero) / <i>Authorized Stay (until 29th of February)</i>
D. Javier Rodríguez Azañedo	Autorización de Permanencia (hasta 31 de marzo) / <i>Authorized Stay (until 31st of March)</i>

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Miguel Ángel Moreno Alba	Ayudante de Investigación OPI / <i>Research Assistant OPIs</i>
D. Ángel González Valdenebro	Ayudante de Investigación OPI / <i>Research Assistan OPIs</i>

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

Dr. Juan Francisco Vega Borrego	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
---------------------------------	---

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz	Profesor de Investigación / <i>Research Professor</i>
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascañana	Profesor de Investigación / <i>Research Professor</i>
Dra. Aurora Nogales Ruíz	Investigador Científico / <i>Research Scientist</i>
Dr. Fernando Ania García	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dra. María José Capitán Aranda	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dr. Victor Cruz Cañas	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>
Dra. M ^a Cruz García Gutiérrez	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i>

Dra. Amelia Linares Dos Santos Prof. Francisco José Baltá Calleja	Científico Titular / <i>Tenured Scientist</i> Profesor de Investigación “ad honorem” / <i>Research Professor “ad honorem”</i>
Dr. Francisco Javier Ramos Díaz Dra. Carmen Arribas Arribas D ^a Anna Espasa Valdepeñas	Investigador Contratado RyC / <i>Tenure Track Contract R&C.</i> Doctor Vinculado / <i>Adjoint Researcher</i> Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (desde 16 de enero) / <i>University Graduate Youth Guarantee Program (since 16th of January)</i>
D. Edgar Gutiérrez Fernández	Titulado Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (desde 16 de enero) / <i>University Graduate Youth Guarantee Program (since 16th of January)</i>
D ^a . Margarita Hernández González	Titulado Superior Contratado (hasta 29 de febrero) / <i>University Graduate (until 29th of February)</i>
D ^a . Jing Cui	Becaria Predoctoral (hasta 13 de noviembre) / <i>PhD Fellowship (until 13th of november)</i>
D. Eduardo Sánchez Sánchez	Titulado Superior Contratado (hasta 31 de julio) / <i>University Graduate (until 31st of July)</i>
D ^a . Patricia Enrique Jiménez D. Álvaro Rodríguez Rodríguez D. Alexis J. Amagua Naula	Contrato Predoctoral FPI / <i>Predoctoral Contract FPI</i> Contrato Predoctoral FPI / <i>Predoctoral Contract FPI</i> Autorización de Permanencia (desde 1 de abril) / <i>Authorized Stay (since 1st of April)</i>
D. Rubén Casas Ruiz	Autorización de Permanencia (del 18 de mayo al 31 de agosto) / <i>Authorized Stay (from May 18th to August 31st)</i>
D. Alejandro Clemente Moral	Autorización de Permanencia (del 18 de mayo al 31 de agosto) / <i>Authorized Stay (from May 18th to August 31st)</i>
D ^a . Izabela Irska	Autorización de Permanencia (del 15 de octubre al 17 de diciembre) / <i>Authorized Stay (from October 15th to December 17th)</i>
Personal de apoyo / Support Staff:	
Dr. José Carlos Canalda Cámara	Técnico Superior Especializado de OPIS / <i>Specialized University Graduate OPIs</i>
D. Guillermo Juárez Segura	Técnico Superior Contratado Programa Garantía Juvenil (desde 16 de enero) / <i>Technician Contract Youth Guarantee Program (since 16th of January)</i>
D ^a . María José Malagón Sisto	Ayudante de Investigación de OPIS (hasta 30 de noviembre) / <i>Research Assistant OPIs (until 30th of November)</i>
D ^a . Virginia Souza-Egipsy Sánchez	Técnico Superior Especializado de OPIS (desde 19 de abril) / <i>Specialized University Graduate OPIs (since 19th of April)</i>

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCES AND ADMINISTRATION

D ^a . Marta M ^a Granja Perdices D ^a . Rosario Carrasco Nicolás	Gerente en funciones / <i>Manager</i> Ayudante de Investigación de OPIS (desde 17 de octubre) / <i>Research Assistant OPIs (since 17th of october)</i>
D ^a . Purificación Díez Rodríguez	C. General Administrativo de la Admon. del Estado / <i>General Administration</i>
D ^a . Alicia Fernández Clavero D ^a . Ana María García Arribas D ^a . Carmen García Collado D ^a . Beatriz Gil Sánchez	Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i> Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i> Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i> C. General Administrativo de la Administración del Estado / <i>General Administration</i>
D ^a . Susana Esteban Serrano	Cuerpo Auxiliares Postales y de Telégrafos (hasta 31 de mayo) / <i>Auxiliary (until 31st of May)</i>
D ^a . Isabel Lombán Botello	Auxiliar OO.AA. / <i>Auxiliary OO.AA.</i>

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN / CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

D^a. Clara Isabel Cardeñosa García C. General Administrativo de la Administración del Estado/
General Administration
D. José Manuel Segura González C. Auxiliar de Telecomunicaciones/*Auxiliary Telec.*

BIBLIOTECA / LIBRARY

D^a. Flora Granizo Barrena Técnico Biblioteca y Documentación/*Library and Doc. Specialist*

CONSERJERÍA / RECEPTION

D. Eduardo Balbás Utrilla Ayudante Gestión y Servicios Comunes (jubilado el 12 de
octubre) / *Common Services Assistant (retired on April 13)*
D^a. Soledad Moreno Zambrano Ayudante Gestión y Servicios Comunes / *Common Services
Assistant*

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

D. Luis Fernández Felipe Técnico Auxiliar Informático de la Administración / *IT Technical
Auxiliaries*
D. Francisco Daniel Rincón Fuentes Técnico Especializado de OPIS / *Technical Specialized OPIs*

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. Joaquín Delgado Hernández Contrato Programa Garantía Juvenil del CSIC (desde 1 de junio)
/ *Contract of Youth Guarantee Program CSIC (since 1st of June)*
D. Ignacio Gómez Leal Contrato INEM (hasta 31 de marzo) / *INEM Contract (until 31st
of March)*
D. Fernando Pueyo García Técnico Especialista Grado Medio de OPIS / *Technical Specialist
OPIs*
D. Sergio Yubero Martínez Contrato INEM (desde 1 de noviembre) / *INEM Contract (since
1st of November)*
D. Julián Zamorano Triviño Contrato INEM (hasta 31 de marzo) / *INEM Contract (until 31st
of March)*

TALLER MECÁNICO / MECHANICAL WORKSHOP

D. Luis Ángel de Prado Serrano Ayudante de Investigación de OPIS / *Research Assistant OPIs*

TALLER ÓPTICO / OPTICAL WORKSHOP

D. José Lasvignes Pacheco Técnico Superior de Actv. Técnicas de Mantenimiento y
Profesionales / *Technical and Professional Activities Technician*

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

2A.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Cosmología cuántica.
- Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos.
- Agujeros negros.
- Teorías de gravedad cuántica y geometría multi-fractal.
- Teoría cuántica de campos.
- Combinatoria.
- 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.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Modelos integrables cuánticos.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares de interés astrofísico y atmosférico.
- Interacciones de Van der Waals en ZIFs.
- Fotodisociación de radicales orgánicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Geometría fractal.
- Formalismo Hamiltoniano geométrico.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Métodos numéricos para la solución de ecuaciones no lineales acopladas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hipersféricos.
- Grupo de renormalización.
- Métodos ab initio altamente correlacionados.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN

Durante el año 2016, el Grupo de Gravitación y Cosmología ha continuado el estudio de las técnicas de cuantización de campos en cosmología y de la aplicación de dichas técnicas a la investigación de perturbaciones cosmológicas y otros escenarios de interés en astrofísica relativista, así como a sistemas análogos en física de materia condensada. Parte de la investigación se ha dedicado a la determinación de criterios capaces de asegurar la unicidad de la cuantización de Fock de campos fermiónicos en espaciotiempos cosmológicos, y por lo tanto lejos de la estacionariedad. Este estudio de los fermiones generaliza trabajos previos del Grupo sobre la cuantización de Fock de campos escalares y perturbaciones tensoriales. De manera similar a la situación que se había encontrado para esos campos escalares y tensoriales, aunque enfrentando ahora una complejidad mucho más rica, estos criterios seleccionan también una dinámica esencialmente única para los campos fermiónicos en este tipo de espaciotiempos curvos, llevando a una separación natural entre el fondo cosmológico y unas variables de campo que evolucionan unitariamente. Para los fermiones, esta separación no es un mero rescalado del campo. Hacemos notar que la unitariedad de la evolución garantiza que la coherencia cuántica de

los fermiones se preserva: no ocurre ninguna pérdida de información para partículas fermiónicas adaptadas a esta noción de dinámica, para la que se ha extraído adecuadamente la dependencia en el fondo.

Hemos avanzado aún más en la aplicación de estos criterios de unicidad al considerar la cuantización de Fock de campos escalares en espaciotiempos de tipo Bianchi I. De nuevo, hemos demostrado que estos criterios garantizan la unicidad en la elección de una dinámica que respeta la unitariedad, así como de la representación de Fock para las relaciones de conmutación canónicas asociadas. Esta es la primera vez que nuestros criterios de unicidad se han implementado en espaciotiempos anisótropos. El éxito de nuestra propuesta abre nuevas vías para la cuantización de campos de materia y perturbaciones en escenarios anisótropos en cosmología cuántica.

Además, hemos combinado estos resultados sobre la cuantización de Fock en espaciotiempos curvos con el enfoque híbrido introducido por nuestro Grupo en Cosmología Cuántica de Lazos (Loop Quantum Cosmology en inglés), con el objetivo de analizar las consecuencias de la cuantización simultánea de los campos de materia y de la geometría en la formación y desarrollo de las perturbaciones cosmológicas. Hemos extraído ecuaciones modificadas para las perturbaciones cosmológicas, que retienen estos efectos de gravedad cuántica y que podrían conducir a predicciones falsificables, por ejemplo en el fondo cósmico de microondas. Asimismo, hemos generalizado nuestro estudio a esquemas de cuantización en cosmología distintos de la Gravedad Cuántica de Lazos. De esta manera, hemos construido un marco generalizado para nuestro enfoque híbrido que se ha mostrado consistente y capaz de incorporar todas las modificaciones de geometría cuántica al espectro primordial de las perturbaciones, más allá de las típicas aproximaciones semiclásicas empleadas usualmente en cosmología cuántica.

Otro tema que hemos investigado es si el efecto ultravioleta dominante en el colapso gravitatorio de estrellas masivas puede ser una transición de agujero negro a agujero blanco. Estudiando el cruce entre capas esféricas nulas en geometrías que describen esta transición, hemos obtenido las condiciones para que aparezca la llamada inestabilidad de Eardly. Las transiciones con tiempos característicos largos son patológicamente inestables, mientras que las que tienen tiempos característicos cortos son robustas frente a perturbaciones, de manera que los procesos correspondientes podrían tener lugar en escenarios astrofísicos. También hemos construido una descripción tensorial de la percepción de partículas en un agujero negro y hemos establecido una clara separación entre la parte radiativa (de Hawking) y la contribución del efecto Unruh a las medidas de un detector en un agujero negro; a la vista de esto hemos argumentado que cruzar lentamente un horizonte de agujero negro podría no ser posible. Desde otro punto de vista, hemos estudiado el proceso de termalización para detectores de partículas en el efecto Unruh y también la posibilidad de transmitir información en intervalos temporales con campos sin masa en escenarios cosmológicos. Finalmente hemos analizado cómo las simetrías físicas pueden dar lugar a simetrías gauge emergentes en el caso de un campo vectorial.

En paralelo, las llamadas teorías multi-fraccionarias (teorías de gravedad cuántica donde la estructura del espaciotiempo es la típica de los multi-fractales) han experimentado un desarrollo notable gracias a nuestros esfuerzos. Por un lado, se ha formulado por primera vez una definición de geometría fractal lorentziana y una clasificación de las teorías de gravedad cuántica según el tipo de flujo dimensional que les caracteriza. Hemos construido rigurosamente el Modelo Estándar de interacciones electrodébiles y fuertes en dos teorías multi-fraccionarias (con derivadas con peso y con derivadas de tipo q), a partir de las simetrías de la acción. Se completó así la formulación teórica y conceptual de estas teorías. Por otro lado, hemos logrado obtener una impresionante cantidad de cotas observacionales directas sobre las escalas fundamentales de las geometrías multi-escala, procedentes de la electrodinámica cuántica (variación de la constante de estructura fina y efecto de Lamb shift), de las interacciones débiles (vida media del muón), de observaciones astrofísicas (ondas gravitatorias y GRBs) y de la Radiación Cósmica de Microondas (CMB en inglés). Hemos comparado las teorías multi-fraccionarias con las de gravedad cuántica tradicionales y demostrado como las ondas gravitatorias observadas por LIGO pueden restringir eficazmente, por sí solas, el espacio de los parámetros de dichas teorías, mientras que las mismas observaciones pueden decir muy poco respecto a la escala de energía de gravedades cuánticas. Con la obtención de cotas fuertes sobre las escalas de la medida geométrica, se completa también la fenomenología de dos de las tres teorías multi-fraccionarias.

El descubrimiento de ondas gravitatorias de origen astrofísico por parte de LIGO ha permitido reevaluar la observabilidad de efectos de gravedad cuántica. Dichos efectos se codifican en relaciones de dispersión modificadas que afectan a la propagación de las ondas de geometría en el espaciotiempo. Lamentablemente, las observaciones de LIGO no ponen cotas fuertes sobre la escala de energía a partir de la cual deberíamos empezar a notar efectos de gravedad cuántica. Nuestro Grupo ha obtenido este resultado tanto para un modelo no-local debido a Padmanabhan como en casos fenomenológicos más generales. Además, nuestras cotas permitieron la primera comparación, a nivel de la fenomenología, entre teorías de gravedad cuántica y teorías multi-fraccionarias.

Por último, hemos concluido el estudio riguroso del flujo dimensional, el cambio de la dimensión efectiva del espaciotiempo (desde la dimensión topológica 4 a grandes escalas hasta un valor menor a escalas de Planck) observado en virtualmente todas las gravedades cuánticas, tanto en enfoques continuos como discretos. Hemos también definido la dimensión espectral en el marco de teorías de campos, solucionando así algunos problemas conceptuales que surgen en

la interpretación tradicional de la dimensión espectral en términos de un proceso de difusión. Nuestros trabajos consolidan el aparato teórico utilizado en los estudios del flujo dimensional en la literatura de gravedad cuántica.

En el contexto del estudio riguroso de la formulación hamiltoniana para teorías de campos, hemos avanzado en dos direcciones diferentes. Por un lado, hemos prestado atención a la interacción entre las simetrías de gauge internas y los difeomorfismos en modelos parametrizados, en particular el electromagnetismo. Aunque el electromagnetismo parametrizado ha sido considerado en el pasado por varios autores, faltaba una comprensión satisfactoria de sus rasgos más sobresalientes, en particular sus simetrías. Es posible resolver este problema de forma satisfactoria utilizando los métodos Hamiltonianos geométricos desarrollados por Gotay, Nester y Hinds a finales de la década de los setenta. En este ejemplo particular hemos encontrado una interacción muy interesante entre la invariancia de gauge y la evolución temporal. Específicamente, hemos demostrado que sólo puede haber dinámica no trivial en el sector de la hipersuperficie de las ligaduras en el que se cumple la ley de Gauss. Fuera de este sector la evolución temporal se congela y el sistema se comporta de manera trivial. Este tipo de comportamiento también puede ser entendido, con algunas dificultades técnicas, como procedente de una bifurcación del algoritmo de ligaduras de Dirac (se da una situación similar en el estudio de modelos de Chern-Simons de dimensión superior). De hecho, los métodos geométricos que utilizamos resultan ser eficaces y de uso sencillo; ciertamente mejores que los enfoques estándar.

Un segundo sistema que hemos analizado en detalle es el campo escalar parametrizado definido en regiones espaciales acotadas. La principal cuestión de interés en este contexto es la incorporación de diferentes tipos de condiciones de contorno. De hecho, una clase importante de ellas (las de tipo Robin) han presentado grandes dificultades que han impedido su comprensión satisfactoria hasta la fecha. En este ejemplo, la cuestión técnica principal está relacionada con el hecho de que los tratamientos estándar (es decir, no geométricos) no son adecuados para tratar con variedades de diferente dimensión (en este caso el volumen y la frontera del espaciotiempo). El uso de métodos geométricos abstractos, con su independencia explícita en las coordenadas, nos permitió eludir los problemas técnicos asociados con la presencia de fronteras. La formulación final que encontramos para el modelo proporciona una extensión consistente de los resultados conocidos para el sistema no parametrizado sujeto a diferentes familias de condiciones de contorno (Dirichlet, Neumann y Robin). Como en el ejemplo del campo electromagnético hay una interacción entre ciertas ligaduras --relevantes sólo en las fronteras-- y la evolución temporal.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Tasas de desintegración débil en entornos astrofísicos

Las estrellas constituyen excelentes laboratorios en los que todas las fuerzas de la naturaleza están involucradas. Su relativa importancia determina la generación de energía y la nucleosíntesis de elementos y en definitiva la evolución estelar. Mientras que la secuencia principal en la evolución estelar y la generación de la mayoría de elementos por debajo de $A=60$ se producen en la fase hidrostática, determinada por la relación de equilibrio entre fuerzas gravitacionales, nucleares y electromagnéticas, la interacción débil incrementa su importancia en las últimas fases de la evolución estelar cuando las densidades y temperaturas son suficientemente altas favoreciendo las capturas electrónicas por los núcleos. De hecho, las desintegraciones beta y las capturas electrónicas determinan en gran medida la estructura de la estrella en las fases precedentes a las explosiones de supernova.

Un conocimiento preciso de los procesos astrofísicos requiere necesariamente información de la física nuclear involucrada en ellos. Desgraciadamente la mayoría de los procesos relevantes no pueden ser medidos directamente debido a las condiciones extremas de densidad y temperatura irreproducibles en el laboratorio. Por tanto, las distribuciones de Gamow-Teller deben ser estimadas a través de modelos teóricos y las incertidumbres en estos modelos eventualmente afectarán la confiabilidad de las simulaciones astrofísicas. En este trabajo se estudiaron las tasas de desintegración débil en condiciones de densidad y temperatura típicas de diversos escenarios astrofísicos. El estudio se llevó a cabo para núcleos de la capa fp que son representativos de la composición del core estelar en formaciones pre-supernova. El modelo teórico en el que basamos este estudio consiste en la aproximación de fases al azar de cuasipartículas (QRPA) con campos medios obtenidos autoconsistentemente mediante cálculos deformados de Hartree-Fock con fuerzas de Skyrme y correlaciones de apareamiento. Se incluyen así mismo fuerzas residuales de tipo espín-isospín tanto en el canal partícula-hueco como en el canal partícula-partícula. Las deformaciones correspondientes al núcleo en equilibrio se obtienen autoconsistentemente estudiando las superficies de energía que nos muestran la energía del núcleo para cada posible deformación nuclear. Estos cálculos han sido capaces de reproducir las principales características de las distribuciones de Gamow-Teller obtenidas mediante reacciones de intercambio de carga. Comparando así mismo con cálculos de referencia de Shell Model se observa que la calidad de los resultados es similar en su comparación experimental. Las contribuciones debidas a la eventual participación de estados excitados en el núcleo padre que pueden ser poblados térmicamente se han calculado explícitamente en el caso de una serie de núcleos impares de especial relevancia en los que las excitaciones de cuasipartícula aparecen a muy baja energía de excitación y por tanto son fácilmente poblados. Encontramos que las contribuciones de los estados excitados a las tasas de desintegración dependen del entorno de densidad y temperatura, de los factores de fase y de la estructura nuclear. En general se obtienen resultados similares a los debidos a la contribución del estado fundamental debido a la

compensación de las distintas probabilidades de población siempre y cuando la estructura de la distribución de Gamow-Teller no difiera mucho entre los distintos estados.

En el transcurso de este año también hemos continuado estudiando los procesos de doble desintegración beta con emisión de neutrinos contrastando los resultados teóricos con la información experimental existente tanto para las desintegraciones de cada una de las ramas del proceso extraídas de experimentos de reacciones con intercambio de carga como para la vida media del doble proceso observada experimentalmente. El propósito final es calibrar los modelos teóricos necesarios para la descripción del proceso de doble desintegración beta sin emisión de neutrinos, aún no observado, que proporcionaría información única sobre la naturaleza del neutrino y su masa absoluta. En concreto se han estudiado estos procesos en las parejas (^{76}Ge , ^{76}Se), (^{116}Cd , ^{116}Sn), (^{128}Te , ^{128}Xe), (^{130}Te , ^{130}Xe) y (^{150}Nd , ^{150}Sm) con estados intermedios en los núcleos ^{76}As , ^{116}In , ^{128}I , ^{130}I y ^{150}Pm , respectivamente.

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

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

Caos cuántico

Hemos estudiado las fluctuaciones espectrales del núcleo ^{208}Pb utilizando el espectro experimental de 151 estados hasta energías de excitación de 6.20 MeV recientemente identificado en la laboratorio Maier-Leibnitz en Garching, Alemania. Los estados de paridad natural muestran resultados muy próximos a las predicciones de la teoría de matrices aleatorias para la distribución de espaciamientos a primeros vecinos. Se puede conseguir una estimación cuantitativa del acuerdo utilizando el parámetro de Brody ω , que toma un valor $\omega=0$ para sistemas regulares and $\omega\approx 1$ para sistemas caóticos. Obtenemos $\omega=0.85$ que es, el valor más cercano al caos jamás observado para estados ligados del núcleo atómico. Por el contrario, los estados de paridad no natural están lejos del comportamiento de matrices aleatorias. Interpretamos estos resultados como una consecuencia de la intensidad de la interacción residual en el ^{208}Pb que, de acuerdo a los datos experimentales, es mucho más fuerte para estados de paridad natural que para estados de paridad no natural. Nuestros resultados muestran que estados nucleares caóticos y regulares coexisten en la misma región de energía del espectro.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Modelos cuánticos integrables

El modelo BCS que describe un sistema fermiones que interactúan con una fuerza de pairing con elementos de matriz constante, fue propuesto por Bardeen, Cooper y Schrieffer para estudiar el fenómeno de la superconductividad, y resuelto exactamente por Richardson. Más tarde se demostró que este Hamiltoniano era integrable, permitiendo el estudio de la función de onda exacta del sistema de muchos cuerpos en interacción desde la fase normal dominada por fluctuaciones de pairing, a la fase superconductora en la que se condensan pares de Cooper. Guiados por la forma de esta función de onda, estudiamos la aproximación de BCS con proyección de número (PBCS) en una base de partículas y agujeros y establecimos su relación con la teoría de clusters acoplados (CCT). Mientras que la primera describe apropiadamente la fase superconductora en sistemas fermiónicos finitos, la segunda reproduce correctamente las

fluctuaciones de pairing en la fase normal. Este estudio permitió acotar la validez de la aproximación de PBCS en sistemas mesoscópicos no superconductores, y por otro lado valorar la precisión de CCT en esta fase. A partir de este estudio, presentamos una nueva teoría basada en transformaciones de similaridad polinomiales. En el límite de acoplamiento débil este polinomio se convierte en una exponencial dando lugar a la CCT, mientras que en el límite de acoplamiento fuerte el polinomio se convierte en una función de Bessel correspondiente a PBCS. Entre medio, interpolamos entre las dos fases con un único parámetro que se determina variacionalmente. Esta teoría produce funciones de onda muy precisas y los errores en la energía del estado fundamental son menores que el 1% para todo el rango de interacciones.

Semimetales topológicos en tres dimensiones

Durante el año 2016 hemos continuado con la investigación de los semimetales de Dirac y Weyl en tres dimensiones, que han recibido últimamente gran atención debido a las interesantes propiedades que pueden desarrollar como análogos del grafeno en una dimensión superior. Hemos estudiado en particular la protección topológica de los estados de superficie de los semimetales con puntos de Weyl y con una línea de nodos, caracterizándolos como estados evanescentes cuando la estructura de bandas se extiende a momentos complejos. Hemos encontrado de esta manera una secuencia de puntos excepcionales (esto es, puntos de rama con energía cero en el espectro complejo) que nos han permitido identificar un conjunto de estados de superficie con momento complejo indicando el decaimiento en el semimetal tridimensional. En este contexto, hemos visto que los semimetales con puntos de Weyl y con línea de nodos se pueden clasificar en dos tipos, dependiendo de que los Cortés de rama aparezcan en paralelo cortando el eje real del momento complejo (conduciendo en ese caso a estados evanescentes de corta penetración y comportamiento oscilatorio) o estén todos dispuestos a lo largo del eje imaginario (con una penetración más larga y decaimiento puramente exponencial de los estados). La estabilidad de los estados de superficie deriva en nuestra construcción de la estructura compleja que aparece en torno de los puntos excepcionales, con una protección topológica basada en el hecho de que los Cortés de rama no se pueden deshacer por efecto de pequeñas perturbaciones. Hemos confirmado esta propiedad en el caso de los semimetales con línea de nodos expuestos a luz polarizada circularmente, donde hemos podido observar que los puntos excepcionales sobreviven el efecto de tal perturbación, si bien en este ejemplo particular no resulta posible satisfacer condiciones de contorno apropiadas para los estados de superficie debido a la ruptura de la invariancia de inversión temporal por el campo de radiación.

Por otra parte, hemos estudiado también la influencia mutua entre los efectos de desorden e interacción en semimetales de Dirac y Weyl en tres dimensiones. Nos hemos concentrado en particular en el impacto que el desorden puede tener en el comportamiento crítico que estos semimetales desarrollan debido a la interacción de Coulomb de larga distancia. Hemos mostrado que potenciales de desorden de corto alcance (desorden correlacionado) no desestabilizan la fase de líquido no-Fermi que poseen estos sistemas en el régimen de fuerte interacción, si bien inducen en general una reducción de la velocidad de Fermi que compite con el apantallamiento de las interacciones. Como consecuencia de ello, hemos encontrado una línea de puntos fijos inestables (en el régimen de interacción débil) en la que los acoplos efectivos del desorden y la interacción permanecen invariantes de escala. Hemos visto que, a un lado de esta línea (en la fase donde el efecto del apantallamiento es dominante), el sistema fluye a baja energía hacia un régimen con un comportamiento de líquido de Fermi regular. Al otro lado de la línea, el desorden juega el papel dominante, conduciendo al sistema hacia una fase donde la velocidad de Fermi efectiva de las cuasipartículas de electrón se hace cero. Hemos encontrado así mismo que, en el régimen de acoplo intermedio de la interacción, los efectos de apantallamiento predominan, estabilizando una fase semimetálica con parámetros de las cuasipartículas de electrón apropiadamente renormalizados.

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

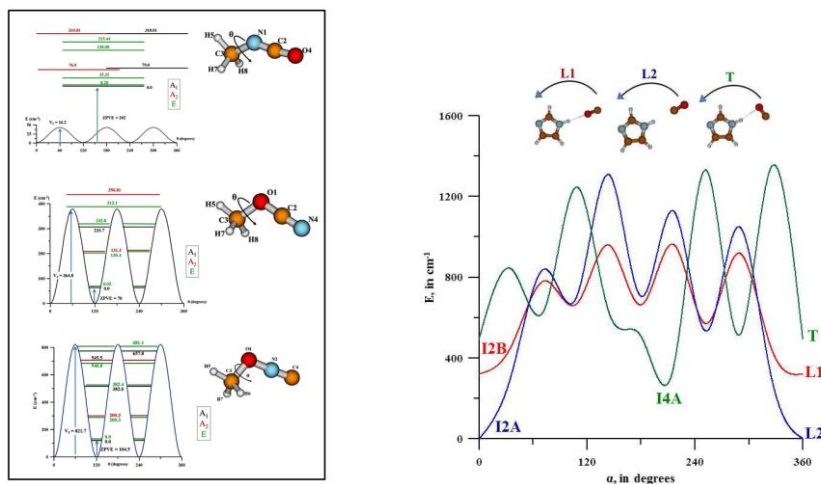
El grupo emplea métodos ab initio altamente correlacionados para caracterizar especies moleculares y procesos químicos de interés astrofísico, para describir nuevos materiales con aplicación a la captación y almacenamiento de CO₂ y para la determinación de los estados electrónicos de Rydberg y disociativos de radicales orgánicos.

Durante el año 2016, hemos realizado estudios moleculares de sistemas de interés astrofísico clasificables en dos sub-líneas de investigación: espectroscopia molecular de moléculas prebióticas no-rígidas, caracterización estructural y espectroscópica de especies semi-rígidas. Empleamos siempre, como herramienta básica, métodos ab initio de alto nivel para determinar estructuras moleculares y superficies de energía potencial. A partir de estas y de nuestros códigos rovibracionales ENEDIM y FIT-ESPEC predecimos propiedades espectroscópicas. Todos los sistemas son de interés para el estudio de la físico-química en fase gas de los medios interestelar y circunestelar y de las atmósferas planetarias.

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

especies que no tienen momento dipolar permanente son susceptibles de ser detectadas con técnicas de infrarrojo. En el infrarrojo lejano se pueden observar a través de sus movimientos de flexión. Durante 2016, hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de las formas neutras, aniónicas y catiónicas del C_6N en colaboración con investigadores de la Universidad King Saud de Ryad. En colaboración con el laboratorio de Astrofísica del Instituto de Física de Rennes y dentro del proyecto AnionCOS estamos estudiando aniones de pequeñas cadenas carbonadas. Estas especies, difícilmente tratables a nivel laboratorio por su baja estabilidad, presentan momento dipolar permanente y por lo tanto son observables mediante radioastronomía. Teniendo en cuenta la evolución de los estados electrónicos de baja energía a lo largo de los procesos de formación y destrucción de dichos aniones, hemos propuesto una regla general que permite predecir la detectabilidad de los aniones en fuentes astrofísicas. Para todas las cadenas carbonadas estudiadas, se han caracterizado estructuras isoméricas; se han calculado superficies de potencial para los primeros electrónicos estados electrónicos, así como propiedades rovibracionales incluyendo efectos de anarmonicidad. Se prevén posibles canales de isomerización así como intersecciones cónicas y efectos rovibrónicos.

Los nuevos observatorios radioastronómicos van a permitir detectar nuevas moléculas y nuevas variedades isotópicas siempre y cuando se conozcan sus espectros en las regiones milimétrica y submilimétrica. Los cálculos ab initio altamente correlacionados permiten determinar las estructuras de mínimo de dichas moléculas así como obtener conjuntos iniciales de parámetros espectroscópicos que pueden facilitar la asignación de dichos espectros. Especial interés tiene el cálculo para caracterizar espectroscópicamente especies prebióticas no-rígidas que presentan niveles vibracionales susceptibles de estar poblados a muy bajas temperaturas y que se pueden detectar en estados vibracionales excitados en zonas de formación estelar. Este año 2016, se ha prestado atención especial a las moléculas orgánicas de gran complejidad que presentan enlaces de hidrógenos intramoleculares, como el etilen-glicol. En colaboración con la Universidad de Lille, se han estudiados los isómeros del isocianato de metilo.



Por último y dentro del entorno de la Acción Marie Curie FP7-CAPZEO, estamos realizando estudios de la interacción del CO_2 y de contaminantes con imidazoles. Se trata de predecir la capacidad de materiales tipo ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) para la captación de residuos atmosféricos. Los cálculos moleculares (potenciales de interacción y estructuras) se aprovecharán en estudios posteriores de simulación de sólidos. Durante 2016, hemos enfatizado en el estudio de la competencia entre el CO_2 y otros gases de efecto invernadero (CO , SO_2 , NH_3) al ser captados por la ZIF's.

2A.2 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA 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.
- Bioespectroscopía.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.
- Aplicaciones Biológicas de la Espectroscopía Vibracional intensificada por nanoestructuras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos en reacciones a energías relativísticas.
- I+D de centelladores para el calorímetro CALIFA para el experimento R3B@FAIR.
- Medida de momentos magnéticos en núcleos exóticos mediante haces de iones radiactivos.
- Instrumentación nuclear.
- Métodos computacionales en Física Nuclear experimental (R3BRoot).
- Herramientas de análisis de datos (Root).
- Experimentación en Física Nuclear Experimental para FAIR.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para Fuentes de neutrones.
- 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.
- Biofuncionalización de nanopartículas plasmónicas.
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula y biodiagnos.
 - Identificación de marcadores espectroscópicos infrarrojos y Raman para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas y neoplásicas.
 - Resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas (nanoantenas).
 - Metamateriales con materiales dieléctricos de alto-índice.
 - Nanofotónica de nanohilos semiconductores.

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.
- Análisis de Experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Métodos Computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de Neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.

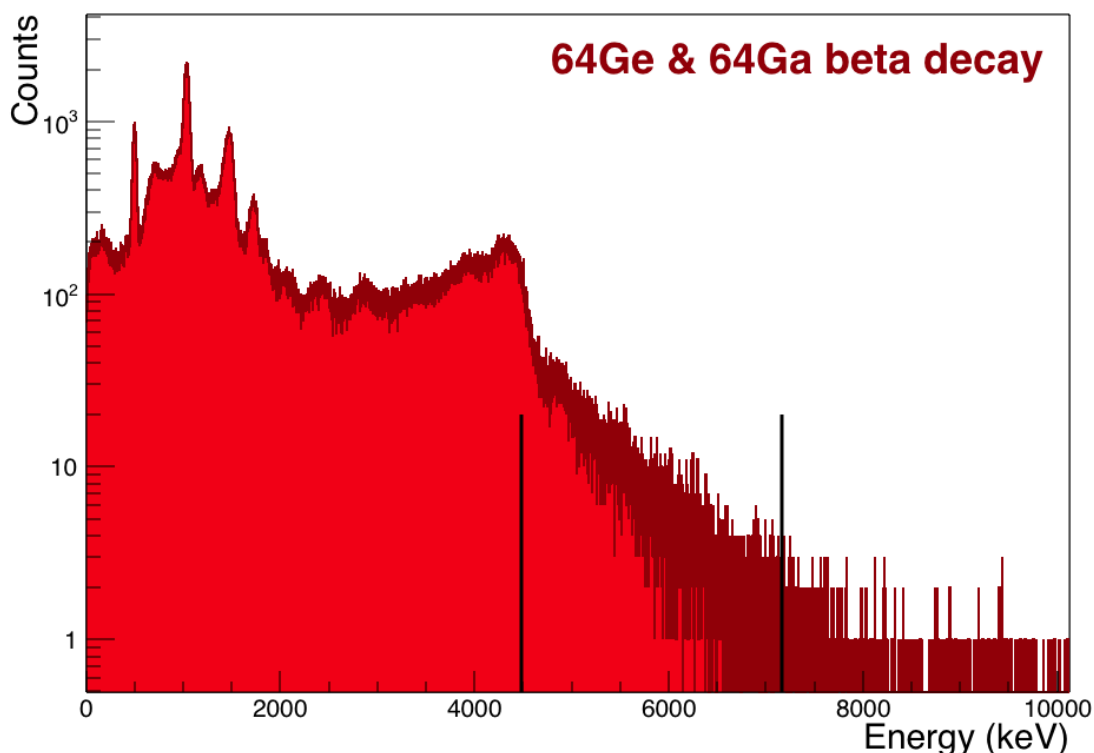
- Espectroscopía Infrarroja y Raman de correlación bidimensional mediante intercambio isotópico H/D.
- Espectroscopía Visible-UV.
- Espectroscopía de Fluorescencia.
- Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM) y de Barrido (SEM).
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopía Infrarroja (FTIR).
- Espectroscopía Infrarroja.
- Espectroscopía Raman (FT1, Normal, Micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS).
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Deposición Asistida por Láser.
- Análisis Estadístico Multivariante.
- Espectroscopía Raman.
- Técnicas de Imaging Resueltas Espacial y Temporalmente.

LABOR INVESTIGADORA:

EXPERIMENTO IS570: BETA DECAY OF THE N=Z, RP-PROCESS WAITING POINTS: ^{64}Ge , ^{68}Se AND THE N=Z+2: ^{66}Ge , ^{70}Se FOR ACCURATE STELLAR WEAK-DECAY RATES @ ISOLDE
(FPA2012-32443: Enrique Nácher, Olof Tengblad, Irene Marroquín, Ángel Perea,)

El objetivo principal de este proyecto es medir la desintegración beta de algunos isótopos deficientes de neutrones de Se y Ge por su importancia en cálculos astrofísicos. En particular, la desintegración beta de ^{70}Se , ^{68}Se , ^{66}Ge y ^{64}Ge y la relación EC/beta⁺ en estas desintegraciones pueden tener cierta influencia en la curva de luminosidad de Rayos X de Tipo I. La técnica experimental propuesta es la Espectroscopía de Absorción Total (TAS) y el lugar ideal para hacerlo es ISOLDE ya que existe una buena producción de los isótopos de interés y existe una instalación permanente de TAS llamada Lucrecia.

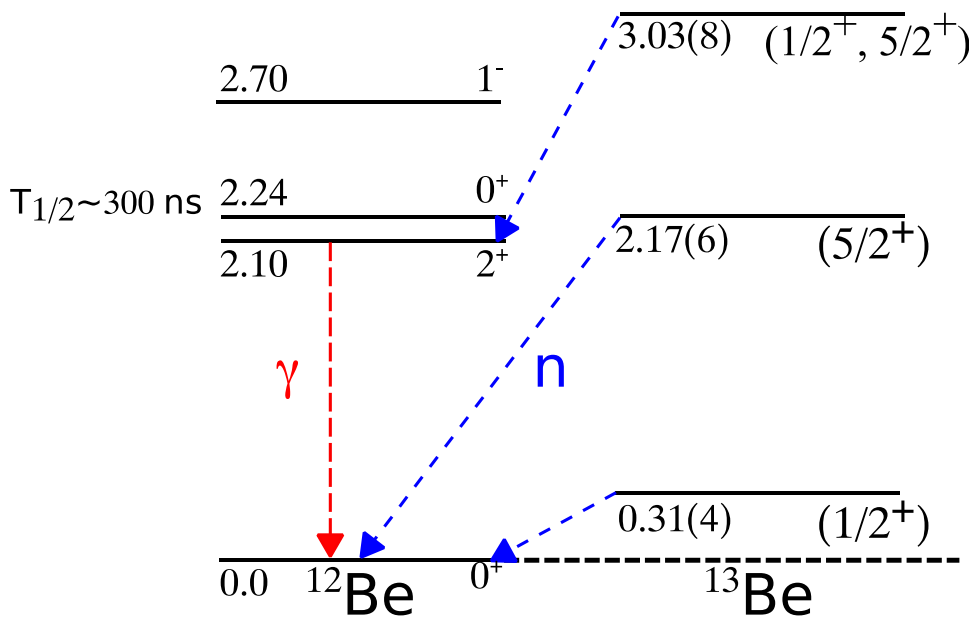
Con este objetivo fuimos a ISOLDE en mayo-2016, montamos el experimento e intentamos medir durante 5 días las desintegraciones de los isótopos ligeros de Se. Sin embargo, hubo muy poca producción/extracción de la forma molecular SeCO y estaba fuertemente contaminada con GeS. Esta es la razón por la cual decidimos medir los isótopos Ge ligeros y no Se. Por lo tanto, medimos la desintegración beta de $^{64,65,66}\text{Ge}$ y sus hijos $^{64,65,66}\text{Ga}$ y estos datos están en preparación para su análisis.



Desintegración beta de ^{64}Ge y su hijo ^{64}Ga medida con el espectrómetro TAS. Las dos líneas verticales representan el valor Q^{EC} de las dos desintegraciones respectivamente.

EXPERIMENT S393 R3B@GSI: STUDY OF NEUTRON RICH NUCLEI BEYOND THE DRIP-LINE
(FPA2012-32443: PhD student FPI2014 G. Ribeiro, E. Nácher, Olof Tengblad)

La tesis de doctorado de nuestro anterior estudiante G. Ribeiro se centró en el análisis de este experimento dirigido al estudio de la estructura de ^{13}Be , un núcleo no ligado y en la línea de goteo de neutrones. La tesis fue defendida en el verano de 2015 y desde entonces hemos estado trabajando en la presentación y publicación de los resultados. Habiendo terminado definitivamente el análisis en 2015, durante el año 2016 nos hemos centrado en la discusión y la interpretación de los resultados. En particular, gracias a la detección de rayos gamma por primera vez en esta reacción, hemos dado una interpretación a la estructura de ^{13}Be que resuelve una antigua discrepancia entre los datos de diferentes laboratorios. El artículo será enviado para publicación en una revista ISI pronto.



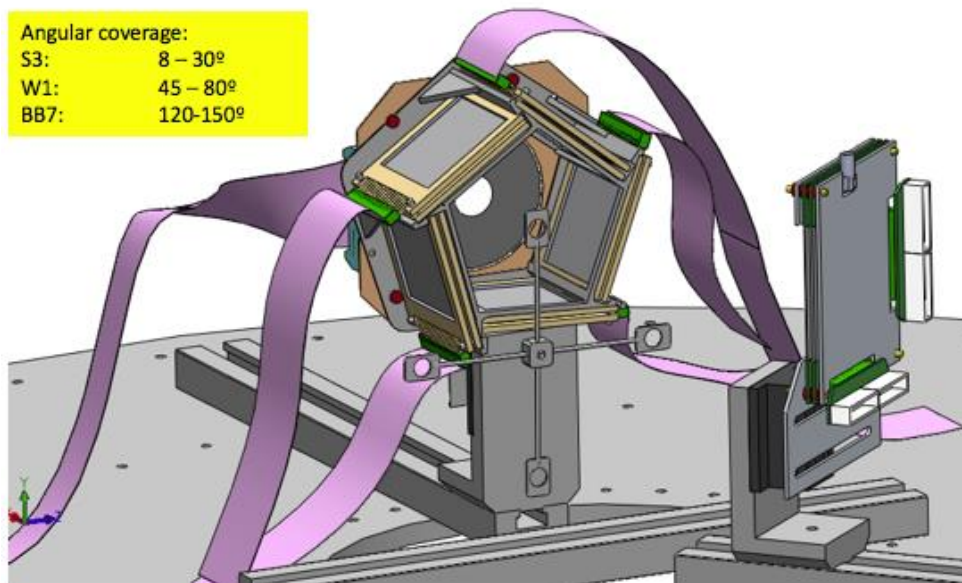
Esquema de niveles de ^{13}Be relativo al estado fundamental de ^{12}Be . Las flechas azules representan las emisiones de neutrones mientras que la flecha roja es la única transición gamma observada en nuestro experimento.

EXPERIMENTO IS561: Transfer reactions at the neutron dripline @HIE-ISOLDE
(FPA2015-64969-P: Olof Tengblad, Irene Marroquín, ÁngelPerea, MJG Borge)

A pesar del intenso trabajo realizado durante los últimos 30 años con respecto a los núcleos halo, sus estados excitados, normalmente no ligados, son altamente debatidos. La mayoría de los estudios se han realizado a energías relativistas. El inicio de HIE-ISOLDE nos permite ahora explorar los estados excitados de los núcleos halo y las resonancias vecinas a través de reacciones de transferencia. La limitación de la energía máxima del haz en REX-ISOLDE (2,5-3,2 MeV / u) ha restringido los experimentos de transferencia a elementos ligeros y sólo a excitaciones bajas. El aumento de la energía del haz en HIE-ISOLDE (5-10 MeV / u) abrirá nuevas posibilidades.

El objetivo final de IS561 es la transferencia (t, p) de dos neutrones a ^9Li que puebla el estado fundamental de ^{11}Li , así como las resonancias bajas. Nuestro objetivo es detectar las partículas cargadas a partir de las reacciones de transferencia, así como los neutrones procedentes de la descomposición de posibles resonancias en ^{11}Li , para ello se necesita una energía de reacción de 7,5 MeV/u.

HIE-ISOLDE fue 2016 en fase de arranque, tuvimos que instalar nuevo equipo en la línea de haz, y no había todavía suficiente energía para la reacción de interés. Por lo tanto, intentamos la reacción más simple (d, p) para verificar la configuración. La nueva instalación fue instalada y tomamos datos a la energía récord de HIE-ISOLDE de 6.8 MeV / u. Se identificaron varias ideas para mejoras; Principalmente en los detectores auxiliares para la observación del haz y para el mecanismo para poder manipular los blancos de reacción desde el exterior. En 2017 el experimento será retomado utilizando un blanco de tritio y con una energía de haz de 7,5 MeV/u.



Vista esquemática del montaje experimental IS561. El blanco de reacción se fija al molino motorizado -en el centro de la figura-. Los productos de reacción son; en la dirección hacia delante, detectados por detectores de tiras de doble cara de Si; El detector de banda circular S3 cubre 8-30 grados y 5x telescopios cada uno compuesto por un delgado ($60\ \mu\text{m}$) DSSD ($256\ \text{píxeles } 3 \times 3\ \text{mm}^2$) y un $1500\ \mu\text{m}$ Si-PAD detector, cubriendo 45-80 grados y finalmente en la dirección atrás un telescopio BB7, donde el DE tiene 32×32 tiras ($1024\ \text{píxeles de } 2 \times 2\ \text{mm}^2$) $60\ \mu\text{m}$ de espesor respaldado por un PAD de $1500\ \mu\text{m}$, cubriendo 120-150 grados.

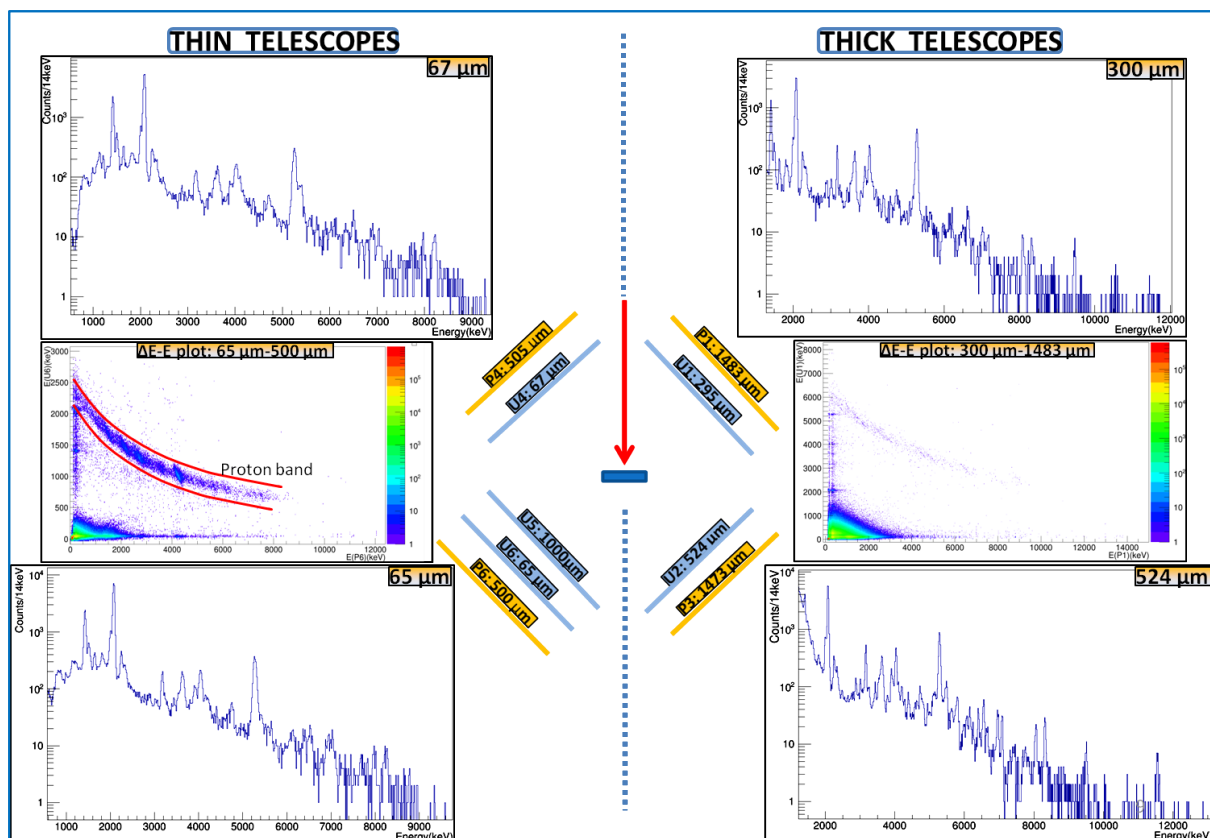
EXPERIMENTO IS577: ESTUDIO DE ESTRUCTURA NUCLEAR DE ^{31}Ar @ ISOLDE

(Proyecto FPA2012-32443, estudiante de doctorado FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Nácher, ÁngelPerea)

Nuestro isótopo de interés en este estudio es ^{31}Ar . Es un núcleo exótico ligero, situado en la línea de goteo de protones. Se trata de un emisor de protones β -retardado con alto valor de reacción Q_β y baja energía de separación protónica. Como consecuencia, muchos canales de decaimiento son accesibles, con lo que ^{31}Ar puede emitir un protón, dos protones e incluso tres protones, después de sufrir un decaimiento beta. Los objetivos de nuestro trabajo son la detección de los canales $\beta 2p$, $\beta 3p$ y el estudio del decaimiento del Estado Isobárico Análogo IAS de ^{31}Cl el hijo de ^{31}Ar tras la desintegración beta.

La instalación IDS - ISOLDE Decay Station, localizada en el CERN, Ginebra, Suiza, es una nueva estación permanente dedicada a medidas de decaimiento β . Se compone de 4 clovers de HPGe (germanio hiperpuro) para la detección de rayos γ que rodean la cámara experimental. Dicha cámara puede ser adaptada y ajustada para diferentes tipos de medidas disponibles en IDS, tales como fast-timing, tiempo de vuelo de neutrones o emisión de partículas cargadas, como es nuestro caso. En nuestro experimento para estudiar ^{31}Ar , usamos la llamada MAGISOL Si-Plugin chamber, diseñada y testeada en nuestro grupo (IEM-CSIC), bajo la colaboración internacional MAGISOL (Madrid-Aarhus-Goteborg). En su interior se encuentra un conjunto de 5 detectores de silicio segmentados (DSSSD $5 \times 5\ \text{cm}$, 16×16 bandas) y 4 detectores no segmentados (PADs) también de silicio, en configuración telescopio para la detección de partículas β y cargadas. Este sistema es muy compacto con gran eficiencia protónica (45% sobre 4π), baja energía de *cut-off* así como buena resolución energética (25 keV) y angular (3°).

En el análisis de este experimento, los estados energéticos de los hijos de ^{31}Ar (^{30}S , ^{29}P) han sido estudiados: se ha visto una alta fragmentación de IAS, que puebla todos los niveles de ^{30}S , además con las coincidencias $1p-\gamma$ $p-p$ hemos identificado niveles cerca del umbral de separación protónica y por último, tenemos por primera vez una clara evidencia de la presencia de coincidencias $2p-\gamma$. El análisis, que se encuentra en progreso, forma parte de la tesis de Irene Marroquín.



Espectros $1p$ de los telescopios son mostrados junto con los ΔE - E plots bidimensionales y el array de detectores DSSSD (U1-U6) and PAD (P1-P6) usados en el experimento. Los espectros muestran una buena resolución energética a bajas y altas energías. Esto se traduce en unas coincidencias p - γ , $2p$ - γ y p - p mejoradas, por lo tanto el análisis de los canales $\beta 2p$ y $\beta 3p$ es muy prometedor (trabajo en progreso).

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

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

A partir de muestras de óxido de grafito (OG), de excepcional calidad, sintetizadas por la Dra. Fabienne Barroso Bujans del Centro de Física de los Materiales en Donostia hemos podido identificar, mediante el uso de técnicas de dispersión de neutrones, fenómenos de ordenamiento y transiciones de fase bidimensionales en la intercalación de 1-Propanol en dicho material. A parte del interés fundamental de estudiar fenómenos de ordenamiento inducidos por interacciones de puente de hidrógeno bajo confinamiento 2D, eventualmente se ha obtenido un nuevo compuesto de OG pilarizado con buena estabilidad térmica de relevancia para las aplicaciones.

Hemos iniciado también una colaboración con la Dr. M. P. De Lara-Castells del Instituto de Física Fundamental en Madrid, orientado hacia el desarrollo y la aplicación de métodos multiescala basados en cálculos “ab initio” en el estudio de procesos físico-químicos en la nano-escala.

DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN AVANZADA PARA FUENTES DE NEUTRONES

Durante el 2016 se han presentado estudios muy detallados acerca del efecto del flujo neutrónico sobre las guías de neutrones usadas en las fuentes de neutrones al uso. Los resultados son de gran relevancia práctica ya que se han podido identificar las causas que eventualmente producen la rotura de dichas guías en las grandes instalaciones de dispersión de neutrones.

NANOFABRICACIÓN

La fabricación de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas es uno de los objetivos más importantes de nuestro grupo. La interacción de nanopartículas plasmónicas de oro y plata con luz de apropiada longitud de onda genera una alta intensificación de campo eléctrico, lo que puede ser utilizado para detección molecular por Raman o Fluorescencia. Es por ello que durante este periodo se han desarrollado métodos de nanopartículas (NPs) metálicas con propiedades plasmónicas interesantes para aplicaciones espectroscópicas y también catalíticas. El principal objetivo de esta nanofabricación ha sido la obtención de sistemas nanoscópicos dotados de una morfología tal que permiten una alta intensificación del campo electromagnético. La estrategia seguida para la obtención de estos sistemas ha sido: a) La preparación de NPs anisotrópicas con morfologías especiales que dan lugar a de gran intensificación de campo, como nanoestrellas; y b) la asociación de nanopartículas esféricas mediante el uso de moléculas bifuncionales, dando lugar a la formación de cavidades interpartícula o *nanogaps* altamente eficaces en la intensificación de la dispersión Raman (hot spots). Se ha prestado una mayor atención a la fabricación de nanoestrellas de plata, ya que presentan un mayor número de ventajas respecto a las de oro, como la mayor eficacia SERS (mayores factores de intensificación) y el mayor intervalo de actividad, ya que las NPs de Ag presentan resonancias de plasmón en todo el espectro visible y en la zona del infrarrojo cercano. Los protocolos de nanofabricación empleados por nosotros evitan el empleo de sustancias surfactantes, como las normalmente usadas en la preparación de nanoestrellas de Au, ya que estas sustancias evitan el acercamiento del analito a estudiar a la superficie disminuyendo así la eficacia de estos sistemas en espectroscopía. Asimismo, se han establecido mecanismos de fabricación de nanopartículas huecas de oro y plata con forma de nanoestrella.

FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES: FABRICACIÓN DE NANOSENSORES

La funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas es también una línea importante de investigación y se le ha prestado especial atención durante 2016. La funcionalización permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando lugar a superficies de altas prestaciones, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados, con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. Además, estas moléculas pueden permitir que las NPs sean biocompatibles, lo que presenta gran interés en aplicaciones médicas, y permiten controlar el acoplamiento de estos sistemas.

DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

La técnica SERS se ha aplicado en la detección de sustancias contaminantes que no necesitan funcionalización debido a la adsorción directa con la superficie metálica. En este sentido, se ha terminado un estudio sobre la detección del pesticida canbendazim en colaboración con investigadores de la Universidad Estadual Paulista de Presidente Prudente en Brasil y la Universidad de Málaga (con los que se mantiene una colaboración como Unidad Asociada del CSIC). Esta sustancia se emplea de manera usual en prácticas agrícolas en muchas partes del mundo, sobre todo en el tercer mundo o en países emergentes, por lo que la detección precoz de la misma es de mucho interés para poder prevenir los efectos nocivos contra la salud. Este estudio ha consistido en una investigación de la adsorción sobre superficies metálicas, mediante espectroscopía Raman, IR y resonancia de plasmón, asistida por un análisis de modos vibracionales normales por DFT de los complejos metálicos.

También se ha progresado en la detección de pesticidas con estructura triazina, los cuales son de los más usados en agricultura, sobre todo en países emergentes como el Brasil, por ello este trabajo se ha desarrollado en colaboración también con investigadores de la Universidad Estadual Paulista de Presidente Prudente en Brasil. Entre estos pesticidas se encuentran la atrazina y la prometrina, de uso generalizado también en todo el mundo. Los primeros experimentos realizados en nuestro laboratorio demuestran claramente que estos pesticidas sufren modificaciones estructurales evidentes consistentes en la pérdida de los grupos alifáticos externos, lo que incrementa fuertemente su solubilidad en agua. El estudio llevado a cabo consiste en la identificación de los productos de degradación y la investigación de los diferentes mecanismos de degradación de estas sustancias.

INTERACCIÓN BIOMOLÉCULA/NANOPARTÍCULA PLASMÓNICA

Se ha progresado enormemente en el estudio de la adsorción de péptidos terapéuticos con nanopartículas plasmónicas. Esta línea de trabajo proyecta la funcionalización de NPs con biomoléculas con el fin de aumentar su biocompatibilidad

y su especificidad biomolecular, así como la sensibilidad en la detección y biodiagnóstico. Se ha analizado la adsorción de los péptidos octreotido, lanreotido y pasireotido sobre superficies de plata y de oro, estudiándose el mecanismo de interacción de estos fármacos.

Se está avanzando en la caracterización SERS/SEF de sustancias húmicas de distinto origen (suelo, leonardita, lignito) sobre NPs de diferente morfología y preparadas mediante diferentes protocolos. Para ello se han empleado muestras llamadas "standard", por ser las que son accesibles comercialmente y se usan en muchos laboratorios. La funcionalización de las superficies con diaminas alifáticas se ha empleado con el fin de aumentar la señal procedente de estos sistemas moleculares de alta complejidad, lo que ha permitido aumentar el rendimiento de los sistemas plasmónicos en la detección de sustancias de alta complejidad estructural, debido a la carga negativa existente en estos compuestos naturales. Estos trabajos se han realizado en colaboración con investigadores de la Universidad de Bolonia (Italia).

Se ha continuado con la caracterización mediante espectroscopias de fluorescencia y Raman y amplificadas, SEF y SERS de los fármacos anti-inflamatorios no esteroideos ketorolaco, indometacina y piroxicam y el antitumoral emodina, con los que ya se tiene experiencia en el laboratorio.

Asimismo, se está investigando el ensamblaje de estos fármacos con las moléculas ensambladoras cucurbituriles. En relación con esto, se han obtenido, cuando ha sido posible, la estequiometría del complejo, el pH de formación, las constantes de unión y la especie molecular de fármaco incluido.

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

La línea de investigación dedicada al estudio del Patrimonio en nuestro grupo se ha centrado en el análisis de determinados colorantes orgánicos de difícil análisis mediante Raman. Otro tema de interés dentro de esta línea sigue siendo la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser sobre fibras de lana con el fin de realizar un análisis in-situ de colorantes. Esta investigación se ha realizado en colaboración con la Universidad de Bolonia. El empleo de este tipo de sustratos metálicos es muy interesante para el análisis in situ de pigmentos y tintes de interés artístico, puesto que se pueden preparar directamente en un punto específico del material (fibras, en este caso), además de no dejar ninguna marca evidente en el mismo. Se ha visto que la irradiación a 442 nm da lugar a nanopartículas más versátiles que irradiando a 532 nm. En el primer caso se pueden obtener espectros SERS a varias longitudes de onda (442, 532 y 785 nm), mientras que en el segundo, solo se pueden llevar a cabo análisis SERS a 532 nm. Las nanopartículas preparadas se han empleado para analizar colorantes sintéticos sobre fibras patrón de lana teñidas y sobre muestras reales.

Se ha llevado a cabo la preparación de nanopartículas de plata para su empleo como soportes para espectroscopía SERS libres de agentes estabilizantes, ya que la presencia de éstos da lugar a la aparición de bandas que interfieren en la detección y/o análisis de los compuestos de interés. A este respecto se han llevado a cabo dos procedimientos diferentes: en primer lugar, la fotorreducción ultravioleta de una sal de plata en un medio polimérico de hidroxipropilcelulosa (HCP) y, en segundo lugar, la ablación láser de plata metálica en medio acuoso. En ambos casos, se han podido obtener espectros SERS intensos de colorantes orgánicos de interés en el Patrimonio Artístico.

Se han preparado coloides metálicos basados en HPC a partir de disoluciones de nitrato de plata y polímero HPC. El sustrato se ha expuesto a diferentes radiaciones incidentes para iniciar y acelerar la reducción de las nanopartículas de plata. Éstas se han caracterizado mediante diferentes métodos microscópicos y espectroscópicos. La espectroscopía de absorción UV-Vis se ha empleado para la determinación de la banda de resonancia de los plasmones superficiales, y la distribución de tamaños de las nanopartículas, mientras que las medidas de microscopía electrónica han dado información del tamaño, forma y distribución de las partículas. Las características del sustrato se han comparado con aquellas preparadas por fotorreducción in-situ por irradiación láser. Se han empleado diferentes compuestos de referencia para evaluar la efectividad de los soportes preparados. Diversas láminas pictóricas (diferentes colorantes en varios agentes ligantes orgánicos, en combinaciones, tanto envejecidos como no envejecidos) preparadas acorde con tecnologías artísticas se han estudiado por espectroscopía Raman (empleando varias líneas de excitación) y espectroscopía SERS. Un parte de esas láminas se habían expuesto a envejecimiento acelerado para simular el estado real de las mismas en las obras de arte y para seguir el posible proceso de degradación. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con la Facultad de Química y Tecnología Química de la Universidad de Lubiana, Eslovenia.

Por otra parte, se ha llevado a cabo la fabricación de nanopartículas de plata por irradiación láser a partir de una pieza de plata pura en medio acuoso en colaboración con el grupo de Láseres, Nanoestructuras y Procesado de materiales del Instituto de Química Física Rocasolano (CSIC). Se han empleado diversas longitudes de onda de un láser de Nd:YAG (1064, 532 y 266 nm). Se empleó una lente de 10 cm para enfocar la radiación sobre la plata sumergida en agua milliQ. Con cada una de las longitudes de onda se emplearon 2 tiempos de irradiación de 25 y 50 minutos, así como 2 fluencias, de 3 y 6 veces el umbral de ablación de la plata. De este modo se han preparado 12 coloides de plata. Las nanopartículas de plata se han caracterizado por espectroscopía UV-Vis y por microscopía TEM. El estudio de la efectividad SERS de los coloides preparados se ha llevado a cabo empleando un colorante sintético como molécula

modelo. Posteriormente se prepararon geles de agar para encapsular las nanopartículas de plata y evitar su floculación. Estos sensores SERS se han empleado para la detección de la molécula modelo y se han calculado los factores de intensificación SERS de los mismos.

Por otro lado, se ha llevado a cabo la eliminación de líquenes en tejas y piedras dolomitas por irradiación láser en colaboración con el grupo de Láseres, Nanoestructuras y Procesado de materiales del Instituto de Química Física Rocasolano (CSIC). En concreto, se han empleado microscopía óptica y espectroscopía Raman para analizar las modificaciones físicas y químicas de las muestras después de la irradiación láser a varias longitudes de onda (266 y 1064 nm)

Se está desarrollando un trabajo de síntesis silicato cálcico hidratado, principal componente de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio, con el fin de evaluar las modificaciones estructurales del mismo por la modificación de la relación Ca/Si inicial. Debido a la naturaleza amorfa del compuesto, las evoluciones estructurales se estudian a través de técnicas espectroscópicas (Raman y ^{29}Si RMN). La microestructura de los geles se estudia por TEM.

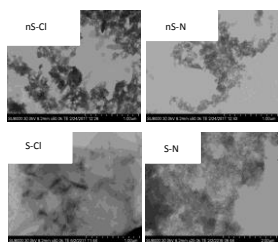


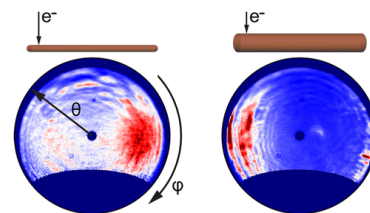
Imagen TEM del silicato cálcico hidratado sintetizado nanosílice (parte superior) y silicato sódico (parte inferior)

En colaboración con el IETCC se trabaja en el desarrollo de tratamientos consolidantes, en el que se utilizan emulsiones alcohólicas de nanopartículas de $\text{Ca}(\text{OH})_2$ como principio activo. El objetivo es incrementar la solubilidad del calcio para disminuir la concentración de producto que hay que aplicar. Se está trabajando inicialmente en la síntesis de nanopartículas de hidróxido cálcico.

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

FOTOLUMINISCENCIA Y CÁTODOLUMINISCENCIA CON NANOHILOS SEMICONDUCTORES

Los nanohilos (NHs) son candidatos prometedores como nanodispositivos de iluminación debido a su eficiencia como emisores de luz y a su flexibilidad de síntesis. La emisión de NHs se acopla por su geometría a modos guiados, que a su vez gobiernan el patrón angular de campo lejano. Hemos investigado dicho acoplamiento mediante un modelo analítico sencillo desarrollado en nuestro grupo. Para demostrar sus predicciones experimentalmente, hemos recurrido a la microscopía de Fourier de fotoluminiscencia y cátodoluminiscencia de NHs con varios diámetros del orden de cientos de nanómetros. Para esos tamaños, concluimos que pequeñas variaciones de unos pocos nanómetros en diámetro pueden producir cambios abruptos en el acoplamiento a modos específicos, y a su vez en el patrón angular de campo lejano. Cabe destacar entre la fenomenología observada para dimensiones específicas de NHs: *beaming* vertical y emisión direccional polarizada por los extremos. Estos resultados son importantes para el diseño de emisores cuánticos, iluminación de estado sólido, y dispositivos fotovoltaicos basados en NHs. Esto se ha realizado en colaboración con los grupos de los Profs. Jaime Gómez Rivas, en el *FOM-Institute DIFFER* (Eindhoven), y Albert Polman, en el *FOM-Institute AMOLF* (Amsterdam).



METAMATERIALES BASADOS EN ESTRUCTURAS DIELECTRICAS DE ALTO ÍNDICE DE REFRACCIÓN

Hemos ahondado en nuestra reciente propuesta teórica sobre la existencia de resonancias magnéticas de plasmones localizados en medios efectivos (metamateriales y metasuperficies) con permeabilidad magnética negativa ($\mu < 0$) basados en meta-átomos dieléctricos de alto índice (HRI, del inglés). En este sentido, se ha explorado la posibilidad de conseguir una plasmónica de $\mu < 0$, de forma que la riqueza de las aplicaciones de la plasmónica "eléctrica" se podrían obtener recíprocamente en su contraparte "magnética", que se puede observar en casi todo el espectro electromagnético,

desde las microondas, THz, hasta regímenes de infrarrojo lejano e incluso cercano al visible. Parte de este trabajo se ha realizado en colaboración con el Prof. J.J. Sáenz (Donostia International Physics Center).

MÉTODOS TEÓRICOS Y NUMÉRICOS EN ESPECTROSCOPIA PLASMÓNICA

Hemos continuado nuestra labor en el campo de las herramientas teóricas y numéricas requeridas para la determinación de las propiedades espectrales de nanopartículas que exhiben fuertes resonancias de plasmones de superficie localizados (LSPR, del inglés). En concreto, nos hemos centrado en geometrías complejas para obtener espectros LSPR “ad-hoc”, con especial interés para: espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas (SERS, del inglés) y calentamiento óptico. Parte de este trabajo se ha realizado en colaboración con el Prof. E.R. Méndez (CICESE, Ensenada, México).

2A.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física molecular de sistemas astrofísicos, atmósferas y plasmas.
- Espectroscopía de plasmas fríos mediante técnicas radioastronómicas
- Cinética de plasmas fríos y estudios de interacciones plasma-superficie.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Cristalización en microchorros criogénicos de líquidos moleculares.
- Espectroscopía infrarroja de alta resolución de iones moleculares de interés astrofísico.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión.
- Control cuántico molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Gases cuánticos ultrafríos.
- Estudio y caracterización espectroscópica de filosilicatos.
- Caracterización teórica de fases secundarias de óxidos de uranio formados en condiciones de almacenamiento de combustible nuclear.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

LABOR INVESTIGADORA:

FÍSICA MOLECULAR DE ATMÓSFERAS, SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Esta línea de investigación se subdivide en los apartados detallados a continuación:

Física molecular de sistemas astrofísicos y atmosféricos

Uno de nuestros objetivos es la generación de hielos similares a los que se encuentran en distintos entornos astrofísicos, como las superficies de granos de polvo del medio interestelar, las superficies frías de objetos lejanos de nuestro sistema solar, o en los núcleos de cometas. Estos hielos están formados mayoritariamente por especies sencillas como H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, y otras especies minoritarias neutras o iónicas. En particular durante el año 2016 nos centramos en el estudio de mezclas de hielos de CH₄ y otros hidrocarburos ligeros, C₂H₆ y el C₂H₄, con el objeto de simular las superficies heladas de objetos transneptunianos como Plutón o Caronte, y ayudar a interpretar los espectros

de alta sensibilidad recogidos por la misión New Horizons de la NASA en 2015. En el laboratorio de hielos registramos espectros NIR y MIR de las especies puras y mezclas binarias de CH₄, C₂H₆ y C₂H₄, a 18 K y 30 K, analizando los cambios observados en los espectros de las mezclas respecto a los de las especies puras (desplazamientos de frecuencia, cambios de intensidad). Adicionalmente, y en colaboración con el grupo del profesor M. A. Satorre de la Universidad Politécnica de Valencia en Alcoy, con el que tenemos un Proyecto Coordinado del MINECO, hemos obtenido las constantes ópticas de estas especies y las intensidades de absorción en el infrarrojo medio y cercano. En el grupo del Prof. Satorre miden densidades de los hielos generados por fase vapor, utilizando idénticas condiciones de depósito que en el laboratorio del IEM. Por otro lado, en el laboratorio de Alcoy miden el índice de refracción, n₀, de estos sólidos para la región visible. La densidad es imprescindible para la estimación de las intensidades de absorción IR y el n₀ para obtener las constantes ópticas. Para esto último utilizamos un software propio diseñado para la obtención de las constantes ópticas de un material depositado sobre un sustrato transparente al IR, a partir de sus espectros de IR de transmisión. Este software constituye una herramienta de gran interés por sus aplicaciones en muestras astronómicas. Estos estudios han dado lugar a dos publicaciones, una en 2016 y otra en enero de 2017.

Por otro lado, hemos estudiado la difusión de CH₄ en hielo de agua a temperaturas entre 40 K y 60 K. El interés de esta investigación reside en que es sabido que en los mantos de hielo del medio interestelar ocurren gran cantidad de reacciones que llevan a la formación de moléculas cada vez más complejas y, eventualmente, a especies prebióticas. La velocidad de reacción de las distintas especies, CH₄, CO, NH₃, etc. en un hielo formado mayoritariamente por agua, depende de su probabilidad de encuentro y, por tanto, de su difusión en este medio. Este trabajo está todavía en marcha, y los primeros resultados han sido presentados en congresos.

Hemos iniciado una colaboración con el grupo de los profesores N. Watanabe y A. Kouchi del Institute of Low Temperature Science de la Universidad de Hokkaido en Sapporo (Japón), para el estudio de hielos formados por mezclas de CO y H₂O, con financiación de un Proyecto i-link del CSIC. Nuestra aportación inicial consiste en modelos teóricos para simular las muestras experimentales generadas en los laboratorios de Japón, y tratar de reproducir los espectros de IR que allí han registrado. Este trabajo está todavía en marcha, y los primeros resultados han sido ya publicados en 2016.

Mantenemos la colaboración con el grupo del Dr. Guillermo Muñoz Caro del Centro de Astrobiología CSIC INTA, en diversos campos. Hemos calculado espectros de IR lejano de hielos de mezclas de H₂O y CH₃OH, y de H₂O y NH₃, siguiendo una pauta empezada el año anterior, que ha dado lugar a una publicación.

Dentro de la colaboración habitual con el Dr. Pedro Gómez de la U. Complutense a través de la vigente Unidad Asociada en la que estamos incluidos, estamos trabajando actualmente en una línea encaminada a predecir espectros en la zona de IR próximo de sólidos amorfos, como los hielos de mezclas de hidrocarburos con agua. El objetivo es comparar esos espectros con los que se obtienen en misiones astronómicas principalmente en el sistema solar, y, en particular, de la sonda New Horizons de la NASA, que ha permitido obtener unos resultados observacionales espectaculares sobre Plutón y Caronte. Estos cálculos son prolijos, pero los resultados previsibles serán de gran interés.

A nivel experimental a lo largo de 2016 hemos diseñado y encargado fabricar una nueva cámara de ultra-alto vacío (con una presión residual en la escala de 10⁻¹¹ mbar). La cámara está ya en nuestro laboratorio y estamos actualmente en el proceso de montaje y se espera empezar a realizar experimentos de ensayo en breve. Este sistema nos abrirá un gran abanico de posibilidades, como la simulación de procesos astrofísicos que requieran una gran pureza, o involucren escalas de tiempo muy largas.

En la parte atmosférica, se continúa con la colaboración con la Dra. María Teresa Baeza Romero, de la Universidad de Castilla La Mancha, con la que se obtuvo financiación del Ministerio de Economía y Competitividad, para el estudio de la formación y reactividad de aerosoles de yodo, desde un punto de vista teórico y experimental. Con la partida del Dr. Oscar Gálvez a la UNED a mediados de 2016, esta línea ha quedado momentáneamente interrumpida, aunque esperamos relanzarla en un próximo futuro.

Se ha continuado con el estudio espectroscópico del aerosol atmosférico descrito como polvo mineral, el cual está compuesto básicamente por filosilicatos tales como esmécticas y montmorillonitas, junto a partículas que varían desde 2 hasta 50 μm de cuarzo, feldespato, calcita, óxidos de hierro y aluminio, silicio, yeso y aragonito, manteniendo la colaboración con la Dra. Ana María Fernández del CIEMAT. Un estudio similar desde el punto de vista técnico se ha comenzado sobre minerales de tipo regolitos, como los que se encuentran en los meteoritos o asteroides del sistema solar. En este proyecto se trabaja con los equipos de Miguel Ángel Satorre (Universidad de Valencia en Alcoy) y de Olga Muñoz (Inst. de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Granada), con quienes compartimos un Proyecto de Redes de Excelencia del MINECO. La coordinación de la red corre a cargo del grupo de Guillermo Muñoz Caro en el CAB, INTA-CSIC.

Se han generado compuestos análogos a los del polvo carbonáceo interestelar utilizado plasmas producidos en descargas inductivas de radiofrecuencia con mezclas de He y CH₄. Los depósitos de carbono amorfo hidrogenado

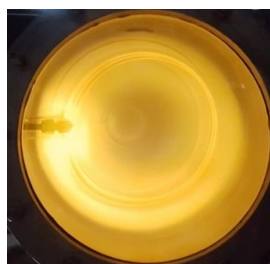
(HAC) así formados se han caracterizado mediante espectroscopía infrarroja y se han bombardeado con electrones de 5 keV para simular el efecto de la irradiación con rayos cósmicos. Sobre este efecto existían previamente en la bibliografía dos experimentos discrepantes, basados en bombardeo con haces de iones. En nuestro laboratorio hemos estudiado la caída de la banda de $3.4 \mu\text{m}$ en función del flujo de electrones a la muestra. Esta banda, correspondiente a vibraciones de tensión CHx, es la marca más característica del polvo carbonáceo en el medio interestelar difuso, pero sin embargo no se observa en el interior de las nubes densas. Estimaciones basadas en nuestras medidas indican que el efecto de los rayos cósmicos sobre el HAC es muy pequeño con lo que apenas afectarían a los portadores de la banda de $3.4 \mu\text{m}$ durante el tiempo de vida ($\approx 10^7$ años) característico de una nube interestelar densa. Es preciso pues buscar otros mecanismos que justifiquen la desaparición de esta banda.

También estamos trabajando sobre muestras de carbono amorfo hidrogenado desde un punto de vista teórico, utilizando herramientas como CASTEP, que permiten predecir espectros para distintas estructuras en función de variables como la densidad, que es crucial y difícil de determinar para polvo astronómico. Los cálculos realizados hasta la fecha sugieren que el polvo interestelar podría tener una estructura formada por pequeños grupos de núcleos aromáticos unidos por cadenas alifáticas. Contamos ya con varias publicaciones en este campo, a las que se añadirán más próximamente.

Se ha culminado el montaje y puesta a punto del reactor de descarga RF capacitiva destinado a la producción de nanopartículas de carbono hidrogenado. Con este reactor se pretende no solo formar partículas similares a las del polvo carbonáceo cósmico, sino también estudiar posibles mecanismos de formación de estas partículas en fase gas de posible relevancia en el medio interestelar. En la puesta a punto del reactor se ha puesto especial atención a los métodos de diagnóstico del plasma (espectrometría de masas de neutros e iones, espectroscopía óptica de emisión y sondas de Langmuir).

Espectroscopía de plasmas fríos mediante técnicas radioastronómicas

Dentro del proyecto europeo Nanocosmos financiado por una Synergy Grant, y junto con el Prof. José Cernicharo, astrofísico perteneciente al ICMM del CSIC y su grupo, y el Observatorio Astronómico de Yebes (Guadalajara), hemos desarrollado, puesto a punto y demostrado con éxito la viabilidad de aplicar técnicas radioastronómicas de gran sensibilidad y resolución espectral al estudio de líneas rotacionales emitidas por especies estables de interés astrofísico como el OCS en una célula de gases a baja presión, y de radicales como el CS o nuevas especies como el CS2 generados en plasmas a temperatura ambiente producidos en dicha célula mediante descargas eléctricas de RF. La radiación procedente del espacio recogida por la antena del observatorio se utiliza como radiación de fondo, dada su baja temperatura de cuerpo negro (50 K). También se ha probado con resultados satisfactorios la detección de los productos de disociación originados por una lámpara de UV sobre los gases introducidos en la célula. Los primeros resultados se analizan actualmente para su publicación.



Montaje de cámara de descarga, detector de radiación milimétrica y dispositivo de enfoque en el Observatorio Astronómico de Yebes para estudiar emisiones rotacionales de radicales y moléculas generados en plasmas fríos.

Dinámica y cinética de reacciones químicas

Hemos concluido el estudio de la dinámica cuántica de la reacción $\text{D} + \text{MuH}(v=1)$, comenzado el año anterior, en el marco de nuestra Unidad Asociada con la Universidad Complutense. Se observa un máximo pronunciado en la sección integral de reacción para el canal $\text{DMu} + \text{H}$ que está causado por un profundo pozo atractivo de carácter dinámico en el potencial adiabático. Estrictamente no se puede hablar de un “enlace vibracional” aunque el pozo es debido al efecto estabilizador de la oscilación del átomo de Mu entre los dos más pesados de H y de D. Lamentablemente no existen ni son separables a corto plazo datos experimentales para este sistema.

Hemos comenzado también el estudio teórico de resonancias dinámicas asociadas a la excitación vibracional en la reacción $F+HD(v)$. Para este sistema, que es un prototipo para la dinámica de reacciones y tiene relevancia en el medio interestelar, existen en la bibliografía medidas experimentales y cálculos teóricos en $v = 0, 1$ que muestran algunos efectos de resonancias en las secciones diferenciales de reacción. Pretendemos investigar el detalle las características de esas resonancias y extender el estudio a niveles vibracionales más altos ($v = 2, 3$) que ahora son accesibles experimentalmente y donde esperamos una influencia mucho más pronunciada de las resonancias dinámicas.

Los principales resultados quedan reflejados en las publicaciones y contribuciones a congresos de esta Memoria.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y Orientación Molecular. Gases Cuánticos Ultrafríos

Se ha continuado el estudio de control de transporte en un gas cuántico de átomos o moléculas en presencia de interacción. El método propuesto utiliza un potencial externo periódico dependiente del tiempo que rompe la simetría espacial pero conserva la simetría temporal, junto a la modulación del parámetro de interacción mediante pulsos de control. En ausencia de interacción, la corriente promedio inducida en el sistema es asintóticamente cero debido a restricciones de simetría. Sin embargo, nuestro trabajo previo demuestra que los parámetros del sistema pueden ser ajustados de forma que la corriente muestra oscilaciones regulares de gran amplitud, cuyo periodo es fácilmente controlable en un rango temporal amplio. En presencia de interacción estas oscilaciones regulares sólo son posibles si la relación entre la amplitud del potencial externo y el parámetro de interacción se mantienen dentro de unos límites. Fuera de estos límites, una interacción muy alta destruye la regularidad de las oscilaciones y el potencial externo es incapaz de modificar la corriente. El control del parámetro de interacción permite iniciar o bloquear el proceso de transporte en un gas ultrafrío de un modo muy preciso, pudiendo generar y controlar una corriente asintótica, cuya amplitud y sentido pueden ser modificados aplicando sucesivos pulsos de control. Durante este año se han analizado las condiciones que optimizan la corriente y permiten su control. Dado que el problema es fuertemente no lineal, la corriente del sistema exhibe un rango muy amplio de comportamientos en función de los parámetros, incluyendo desde la creación de corriente estable a oscilaciones muy irregulares.

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

El Laboratorio de Fluidodinámica Molecular dispone de dos instalaciones de diagnóstico de chorros de gases y líquidos mediante espectroscopía Raman, únicas en su género por sus prestaciones y flexibilidad, desarrolladas a lo largo de los últimos veinticuatro años. Los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil, en el que es viable el estudio de las colisiones moleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Durante 2016 se ha continuado con el estudio de estos flujos en la interfase entre la descripción microscópica, esencialmente molecular y cuántica, y la macroscópica, regida por la mecánica de fluidos en el régimen del continuo. Si bien ambas vertientes están bien desarrolladas como campos independientes, su conexión es una especie de tierra de nadie donde escasean los datos experimentales, los modelos teóricos suficientemente rigurosos, y los métodos de cálculo eficientes.

Se han realizado mejoras en los dos instrumentos del laboratorio. El instrumento A (espectrómetro Jarrell-Ash) se ha adaptado para poder expandir mezclas diluidas de vapor de H_2O . Para ello ha sido necesario instalar un sistema de mezclador-evaporador que opera a 100 C con caudales controlados, junto con un sistema de calefacción de la canalización y la tobera, todo ello estabilizado en temperatura. En el instrumento B (espectrómetro Jobin-Yvon) se ha instalado un nuevo controlador de flujo másico por efecto Coriolis, que permite trabajar con caudales menores que 1 g/hora de H_2O . Ello ha permitido expandir mezclas gaseosas altamente diluidas (<1%) de $H_2O(g)$ en He o H_2 para estudiar y cuantificar el efecto de las colisiones inelásticas de estos gases sobre las moléculas de H_2O , minimizando el efecto de las autocolisiones $H_2O:H_2O$.

En el instrumento A se han realizado numerosos experimentos encaminados a detectar la formación de agregados pequeños (dímeros, trímeros, etc.) de $H_2O(g)$, lo que constituye el comienzo de la condensación molecular. Para ello se han expandido mezclas de $H_2O(g)$ al 3% y 5% en He desde una tobera en rendija de $0,03 \times 2 \text{ mm}^2$, a presiones entre 0,150 y 1,0 bar, haciendo barridos a distancias crecientes de la tobera, y barridos en presión a distancia fija equivalente a un diámetro de tobera. En todos esos puntos hemos registrado el espectro Raman del H_2O en la zona de la tensión O-H (3600 cm^{-1}) pero, por el momento, no hemos observado las nuevas líneas espectrales que delatarían la presencia de agregados moleculares pequeños.

Por su parte, en el instrumento B se han realizado las primeras medidas de mezclas de HD (1%) en *para*- H_2 a una presión de 220 mbar desde una tobera circular de $325 \mu\text{m}$, para determinar las tasas de desactivación nivel-a-nivel por colisiones inelásticas de HD con pH_2 , de gran interés astrofísico pero de las que no se conocen datos ni experimentales ni calculados.

En cuanto al desarrollo metodológico, a lo largo de 2016 se ha procedido a perfeccionar algunos aspectos de la teoría fluidodinámica de jets supersónicos, necesarios para el estudio experimental de las colisiones moleculares inelásticas a

temperaturas superiores a 120 K. Al respecto se han mejorado o creado algunos nuevos códigos FORTRAN (MEQHH.FOR, TnH2T.FOR, TpH2T.FOR, etc.). Asimismo se ha procedido a la reducción de datos crudos (densidades y poblaciones rotacionales) a datos fluidodinámicos (temperaturas translacionales, rotacionales, velocidades de flujo, entropía) de un gran conjunto de experimentos realizados a lo largo de 2014-2015. En concreto, este conjunto cubre cuatro series de expansiones de *para*-H₂ y *nat*-H₂, y tres series de expansiones de H₂O altamente diluida (~1%) en *para*-H₂ y *nat*-H₂. Combinando tales datos en las ecuaciones de Navier-Stokes y de Boltzmann reducida (ecuación maestra cinética) se han determinado las tasas de colisión nivel a nivel de los procesos inelásticos dominantes en colisiones H₂:H₂ en el rango entre 20 y 325 K, así como resultados preliminares sobre tasas en colisiones H₂O:H₂. En todo lo descrito se ha empleado metodología propia del Laboratorio de Fluidodinámica Molecular, tanto experimental como teórica, dada la práctica inexistencia de métodos al respecto en la literatura científica.

Por último, se han registrado nuevos espectros Raman vibracionales y torsionales de dimetil-éter (DME), tanto del isotópomo natural como con ¹³C, y del DME enfriado en chorros supersónicos, empleando una célula especial para expandir gases agresivos (inflamables, disolventes, etc.). La región de los sobretonos torsionales del DME es muy compleja por el acoplamiento con el modo de flexión C-O-C y la abundancia de bandas calientes, pero es de interés astrofísico para detectar estas moléculas en el medio interestelar. El espectro del DME enfriado ha permitido asignar sin ambigüedad los sobretonos torsionales y sus primeras bandas calientes, rectificando la asignación errónea de la literatura. Este trabajo es una colaboración con el Departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M. L. Senent) y con la Universidad de Huelva (M. Carvajal). En el resto del espectro Raman del DME también se ha conseguido una simplificación considerable de la abundante estructura de bandas calientes, lo que abre la puerta a un análisis más seguro del espectro vibracional.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

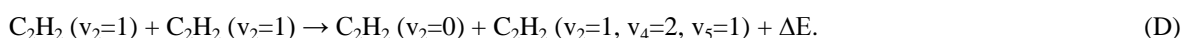
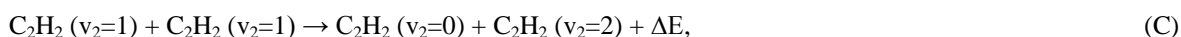
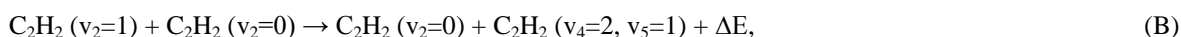
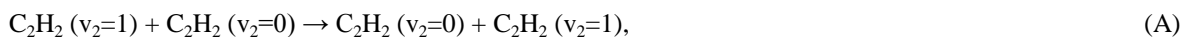
Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos atmosféricos o de combustión

Continuando la colaboración con la Dra. Ha Tran y Tuong Le Cong (Laboratoire de Météorologie Dynamique, UPMC, Paris) se han concluido las simulaciones mediante dinámica molecular clásica de formas de línea en el sistema CH₄/N₂. La comparación con los resultados experimentales obtenidos en nuestro laboratorio de espectroscopía infrarroja por diferencia de frecuencias demuestra que los espectros calculados reproducen fielmente las diferencias con perfil de Voigt, y que este tipo de cálculos ab initio pueden emplearse para predecir los perfiles espectrales en este importante sistema.

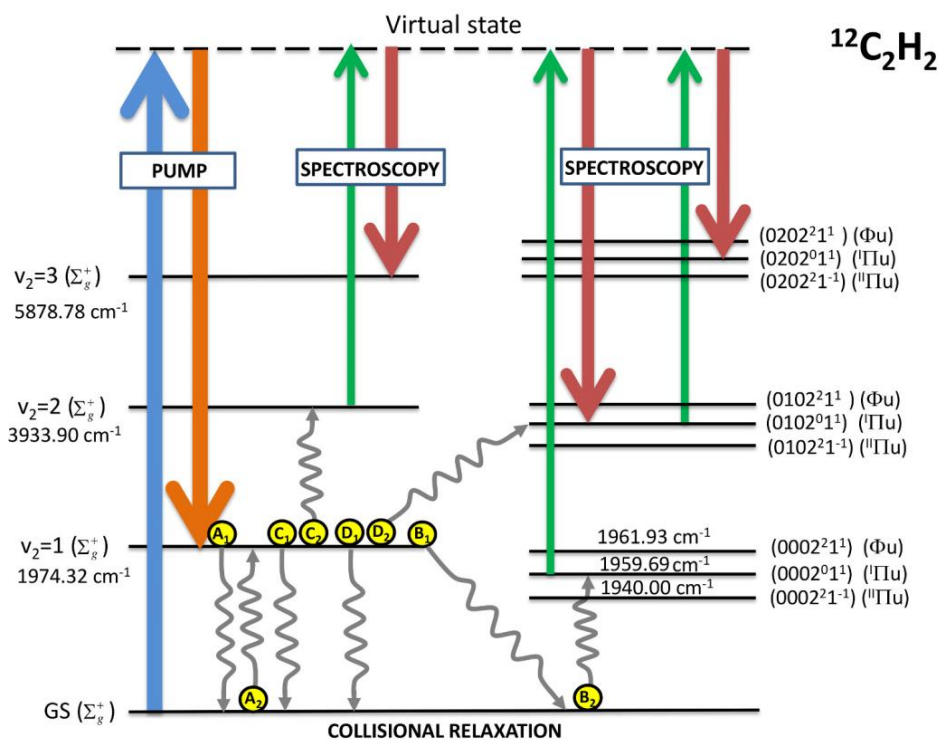
Espectroscopía Raman de estados excitados poblados mediante bombeo óptico y colisiones moleculares

Esta línea de investigación es responsable de la casi totalidad del trabajo realizado en el laboratorio de espectroscopía Raman estimulada durante 2016. Concretamente ha sido completado el estudio de estados vibracionalmente excitados en isotópologos del acetileno, comenzado en los meses finales de 2015, y los resultados han sido publicados en el *Journal of Raman Spectroscopy*.

En la figura adjunta se presenta esquemáticamente el proceso “bombeo→transferencia de energía colisional→espectroscopía” usado en este estudio, particularizado para el ¹²C₂H₂. En un primer paso (bombeo), dos láseres pulsados cuya diferencia de frecuencia esta sintonizada a la frecuencia de la rama Q del fundamental ν_2 (tensión C≡C) del acetileno, se usa para bombear población, mediante un proceso Raman estimulado, a un único nivel rotacional en $\nu_2=1$. Estos láseres se representan en la figura por las dos flechas situadas más a la izquierda (azul y naranja) que conectan los estados inicial y final de la transición a través de un “estado virtual”. Tras esta etapa de bombeo se introduce un retardo para dar tiempo a que la relajación colisional, V-V, extraiga población de $\nu_2=1$ hacia otros estados vibracionales. Los procesos más relevantes de estas transferencias colisionales se representan mediante flechas onduladas etiquetadas A, B, C y D (con los subíndices “1” y “2” representando cada una de las moléculas involucradas en la colisión). Corresponden a colisiones de los tipos:



Entonces entra en juego la etapa de espectroscopía. Esta etapa, también basada en el efecto Raman estimulado, se usa para obtener espectros de alta resolución de transiciones que tiene como niveles de partida los estados poblados colisionalmente. En este experimento, tal como se representa en la figura mediante flechas etiquetadas “Spectroscopy” (verde y rojo), hemos sondeado transiciones que conectan estos estados con otros superiores que difieren de ellos en un cuanto de ν_2 , puesto que a estas transiciones corresponde la mayor sección de scattering Raman.



Como resultado, varios estados no observados previamente en seis isotopólogos del acetileno han sido localizados y asignados, y los valores de energía de otros, previamente conocidos, han sido refinados. Los estados más relevantes observados son:

- $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$: $2v_2, 3v_2, 2v_4+v_5, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_2$: $2v_2, 3v_2, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$: $2v_2, 3v_2, 2v_4+v_5, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{12}\text{C}_2\text{D}_2$: $2v_2, 3v_2$.
- $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$: $2v_2, 3v_2$.
- $^{13}\text{C}_2\text{D}_2$: $2v_2, 3v_2$.

La observación de estos estados ha permitido la obtención de un nuevos y mejorados parámetros vibracionales y rotacionales (como las constantes de anarmonicidad) para la parte inferior del pozo de energía potencial de estas moléculas, algo difícil de conseguir en una familia de moléculas tan extensivamente estudiada como la del acetileno.

Espectroscopía infrarroja de iones moleculares de interés astrofísico

Hemos profundizado en el estudio del ion HCl^+ , con el objetivo fundamental de determinar si hay una contribución apreciable al espectro infrarrojo de la interacción nuclear magnética con el núcleo de H. Para ello se ha realizado un importante esfuerzo experimental encaminado al registro de los espectros a la menor temperatura posible, lo que se ha traducido en el diseño y construcción de una nueva célula de vidrio con aislamiento mediante vacío y de un nuevo cátodo hueco con menor gradiente de temperatura. Ello ha permitido resolver mejor la estructura de algunos multipletes en los estados rotacionales más bajos y así incrementar el número de transiciones incorporadas en el ajuste global de todos los isotopólogos. Las predicciones resultantes de este nuevo ajuste han sido incorporadas al "JPL spectral line catalogue". Adicionalmente se han realizado cálculos de opacidad y densidades de columna en el infrarrojo, que indican que esta especie podría ser observada en el medio difuso mediante telescopios de alta resolución, proporcionando así una alternativa para el estudio de esta especie en el espacio.

En el mismo sentido, se ha iniciado el estudio del ion SiH^+ aún no observado en el laboratorio en la zona de ondas milimétricas, y mal caracterizado en el infrarrojo, y que sin embargo es interés fundamental en el medio interestelar.

2A.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación multiescala de materiales poliméricos y macromoléculas biológicas.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.
- Física de polímeros: Movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Biofísica (Biopolímeros y sistemas biológicos).
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Nanoindentación en materiales poliméricos.
- Nanocompuestos poliméricos: Estructura y propiedades físicas.
- Confinamiento en la estructura y la dinámica de la materia condensada blanda.
- Conformación de materia blanda biológica: Proteínas de membrana en disolución.
- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.
- Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.
- Fenómenos de precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevos polímeros con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión y elongación en polímeros y mezclas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Microscopía electrónica de transmisión: estructura y morfología de polímeros sintéticos y biológicos.
- Hidrodinámica y conformación molecular de polímeros, proteínas y complejos macromoleculares biológicos: pesos moleculares, coeficientes de difusión, radio hidrodinámico,...
- Electrónica orgánica.
- Nano y microestructuración de superficies poliméricas.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido (DSC).
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Nanoindentación.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrreología.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión y tracción.
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento (Grandes instalaciones y GPU).
- Espectroscopía de absorción de rayos X (NEXAFS).
- Dispersión resonante de rayos X blandos (RSoXS).

LABOR INVESTIGADORA:

Grupo de NANOESTRUCTURA Y PROPIEDADES MECÁNICAS DE SISTEMAS POLIMÉRICOS

DESARROLLO DE NANOCOMPUESTOS ELASTOMÉRICOS CONDUCTORES BASADOS EN GRAFENO

La incorporación de grafeno a matrices elastoméricas es de gran interés tecnológico por sus potenciales aplicaciones en el campo de la electromecánica. La optimización de las propiedades de nanocompuestos de grafeno pasa necesariamente por una buena dispersión del refuerzo y una interacción adecuada con la matriz. En este trabajo, y en colaboración con el grupo de la Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), se funcionalizó el grafeno con cadenas cortas de polietileno para, a continuación, incorporarlo en distintas proporciones (de hasta 2.5 vol. %) a un copolímero elastomérico de estireno-b-etileno-co-butileno-b-estireno (SEBS). Las medidas de conductividad eléctrica sobre estos materiales mostraron un umbral de percolación de 0.7 vol. % de grafeno y se pudo comprobar que las propiedades mecánicas mantienen el carácter elastomérico de la matriz hasta porcentajes de grafeno de 1 vol. %. Asimismo, experimentos de difracción de rayos-X a ángulos pequeños (SAXS), llevados a cabo en las instalaciones de radiación sincrotrón ALBA, junto con resultados de microscopía de fuerzas atómicas (AFM) y electrónica de transmisión (TEM), pusieron de manifiesto que el grafeno distorsiona el empaquetamiento cilíndrico de SEBS, reduciendo el tamaño de los dominios y aumentando la distribución isotrópica de los mismos. Estos resultados han permitido justificar la existencia de distintos mecanismos de conductividad para los nanocompuestos con bajas y altas concentraciones de grafeno.

NANOINDENTACIÓN EN NANOCOMPUESTOS DE POLIETILENO Y GRAFENO

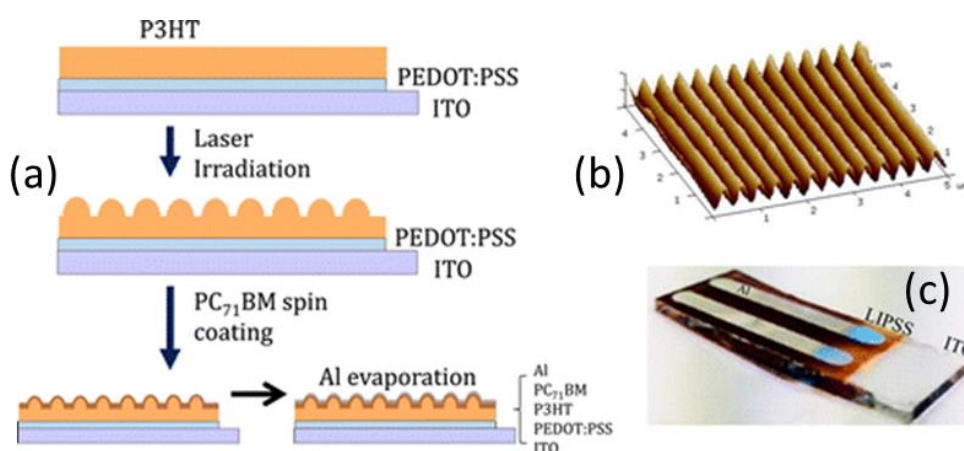
En una fase previa, el grupo de la Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), había preparado nanocompuestos de polietileno de alta densidad (HDPE) con grafeno. Este material había sido modificado empleando tres estrategias químicas distintas. Todas estas rutas dieron lugar al anclaje de cadenas cortas de polietileno a la superficie de grafeno y, en último término, a la producción de nanocompuestos con propiedades mecánicas macroscópicas diferentes. En este trabajo se propuso investigar las propiedades mecánicas locales de estos nanocompuestos de HDPE/grafeno mediante nanoindentación, con objeto de comprender las propiedades mecánicas macroscópicas a partir de la nanoescala. Las medidas de indentación a penetraciones grandes corroboraron que el grafeno modificado, obtenido mediante las diversas estrategias, da lugar a nanocompuestos con distinta dureza, módulo elástico y fluencia, y estos resultados se explicaron en base a la dispersión del nanorrefuerzo, los cambios en la nanoestructura de la matriz con la incorporación de grafeno, y el efecto plastificante del polietileno de cadena corta. Asimismo, se realizó un mapa de propiedades mecánicas en determinadas áreas de la superficie de las muestras, poniéndose de manifiesto que uno de los nanocompuestos presenta una distribución inhomogénea de nanorrefuerzo, en concordancia con los datos mecánicos macroscópicos. Además, los valores de las propiedades mecánicas locales del grafeno resultaron sorprendentemente inferiores a las encontradas en la bibliografía para el grafeno puro y esto puede justificar la poca efectividad del refuerzo sobre la matriz de HDPE, como se había observado mediante medidas macroscópicas. Aun así, se consiguió caracterizar un nanocompuesto con propiedades mecánicas comparables a la matriz de polietileno y con una excelente conductividad eléctrica.

MAPEADO DE UNA ESFERULITA BANDEADA POLIMÉRICA MEDIANTE NANOINDENTACIÓN

El mecanismo de formación de esferulitas bandeadas poliméricas ha intrigado a la comunidad científica desde hace décadas y sigue siendo un tema controvertido hasta la fecha. La explicación más aceptada reside en el giro progresivo de las laminillas cristalinas a lo largo del radio de la esferulita, desde el centro hacia la periferia. Sin embargo, en los últimos años, estudios de microscopía electrónica han propuesto una discontinuidad entre bandas adyacentes. Nuestro grupo, en colaboración con el grupo de BIOPHYM (IEM-CSIC), ha realizado un estudio combinado de nanoindentación y AFM sobre esferulitas de un copolímero de poli(3-hidroxi-butarato-co-3-hidroxi-valerato) P(3HB-co-3HV). El bandeo esferulítico se caracterizó en diversas regiones de interés mediante AFM, y estas mismas áreas se investigaron mediante nanoindentación. Se encontró que el perfil de las propiedades mecánicas a través del bandeo esferulítico oscilaba continuamente, desde un valor máximo en los valles topográficos hasta un valor mínimo en las crestas. Los resultados apoyan el modelo de una rotación continua de empaquetamientos cristalinos donde los cristales laminares se disponen paralelos a la superficies en los valles y perpendiculares en las crestas.

Grupo de DINÁMICA Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA CONDENSADA BLANDA (SOFTMATPOL)**NANO Y MICRO ESTRUCTURACIÓN DE MATERIA CONDENSADA BLANDA CON MORFOLOGÍAS CONTROLADAS*****Celdas Solares Poliméricas de estructuras superficiales periódicas inducidas por láser (LIPSS)***

Hemos continuado explotando las posibilidades de utilización de rayos láser con el fin de nanoestructurar la superficie de películas delgadas de polímeros semiconductores. En cooperación con el grupo de las Dras. M. Castillejo y E. Rebollar (IQFR-CSIC) hemos tenido éxito en la nanofabricación inducida por láser de nanosegundos con diferentes longitudes de onda de estructuras superficiales periódicas (LIPSS) en películas delgadas de mezclas de polímeros semiconductores y fulerenos con aplicación en celdas solares orgánicas. En particular hemos encontrado las condiciones para la formación óptima de las estructuras de superficie periódicas inducidas por láser (LIPSS) sobre las películas recubiertas por "spin-coating" de poli (3-hexiltiofeno) (P3HT). Estas condiciones pueden trasladarse a la mezcla fotovoltaica formada por la mezcla 1: 1 de P3HT y éster metílico del ácido [6,6] -fenil C71-butírico (PC71BM) cuando se deposita sobre un electrodo de óxido de indio y estaño (ITO) recubierto con (poli (3,4-etilenodioxitiofeno): poli (estirenosulfonato) (PEDOT: PSS). Las células solares formadas mediante el uso de una bicapa de P3HT estructurada por LIPSS cubierto por PC71BM o una heterounión con una mezcla P3HT: PC71BM estructurada por LIPSS exhiben generación de electricidad al ser iluminadas por luz solar. Estos resultados sugieren que LIPSS podría ser una tecnología compatible con dispositivos fotovoltaicos orgánicos.



(a) Esquema del procedimiento seguido para la fabricación de una célula solar fotovoltaica polimérica de P3HT/PCBM. (b) Imagen de AFM de una película delgada de P3HT/PCBM nanoestructurada por LIPSS. (c) Imagen de una célula fotovoltaica polimérica.

Efectos de confinamiento en los cristales de poli(9,9 diocilfluoreno)

En colaboración con el doctor Jaime Martín de Imperial College se ha realizado un estudio de la estructura cristalina de un polímero semiconductor cuando este se confina en nanoporos cilíndricos. En el proyecto se compara el comportamiento cuando la cristalización se realiza en presencia o en ausencia de polímero en 'bulk' que se encuentra en la superficie de la máscara de poros. De esta manera se pueden obtener nanohilos de este polímero conductor con orientación cristalina seleccionable.

Aplicación de técnicas con luz sincrotrón para el estudio del autoensamblado de copolímeros de bloque fotosensibles

Se han utilizado técnicas de luz de sincrotrón para investigar, en colaboración con el grupo de Luis Oriol y Mercedes Piñol de la Universidad de Zaragoza, una nueva clase de copolímeros de bloques anfifílicos supramoleculares sensibles a la luz basados en la asociación mediante múltiples enlaces H entre motivos de 4-isobutiloxiazobenceno y unidades de 2,6-diacilaminapiridina. Se ha realizado una caracterización estructural y térmica de estos azo-copolímeros supramoleculares en disolución. El trabajo pone de manifiesto el proceso de autoensamblado de estos polímeros supramoleculares en el agua y el estudio de sus propiedades de respuesta a la luz UV por espectroscopía UV-vis, dispersión dinámica de luz (DLS), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y dispersión de rayos X de ángulo pequeño (SAXS). La presente estrategia de funcionalización de la postpolimerización no covalente ha proporcionado autoensamblajes estables en agua con propiedades de respuesta a la luz que pueden usarse para cargar y activar la administración de moléculas fluorescentes pequeñas.

Modificación de polidimetilsiloxano como base para la formación de microarrugas: caracterización mecánica y química

En colaboración con el Dr. Juan Rodríguez del Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, se ha realizado un estudio sobre los procesos que ocurren durante el tratamiento con ozono-UV en superficies de polidimetilsiloxano, esto

es, la formación de una capa de tipo sílice y la degradación de la superficie. Los cambios químicos se han evaluado mediante Microscopía Raman Confocal con resolución espacial por debajo de la micra, mientras que la degradación parcial de la superficie se ha determinado mediante Microscopía de Fuerza Atómica y profilometría óptica.

DINÁMICA EN CONDICIONES DE CONFINAMIENTO EN MATERIA CONDENSADA BLANDA Y POLIMÉRICA

Relajación y conductividad en mezclas de P3HT/PC71BM mediante espectroscopía dieléctrica

Se han estudiado los procesos de relajación molecular y su relación con la conductividad en la mezcla de polímeros utilizada más frecuentemente como capa activa en hereouniones para células solares fotovoltaicas. Mediante espectroscopía dieléctrica hemos podido determinar que las cadenas laterales del P3HT experimentan un movimiento local de alta frecuencia. También la conductividad del P3HT se ve afectada por la presencia del derivado de fullereno PCBM. En este proyecto hemos podido demostrar que la espectroscopía dieléctrica permite obtener los offset energéticos para el movimiento de portadores de carga debidos a la presencia del fullereno.

DESARROLLO DE NUEVOS MATERIALES POLIMÉRICOS BASADOS EN: A) PTT Y COPOLÍMEROS DE PTT-PTMO CON DIFERENTES NANOADITIVOS Y B) RECURSOS BIOLÓGICOS RENOVABLES

Se ha llevado a cabo un extenso estudio de diferentes compuestos poliméricos basados en poli(trimetilén tereftalato) (PTT) y sus copolímeros con poli(óxido de tetrametileno) (PTT-PTMO) con diferentes nanoaditivos como: polisilsesquioxanos (POSS), nanotubos de carbono de pared simple y múltiple (SWCNT y MWCNT, respectivamente), grafito expandido (EG), nano placas de grafeno (GNP), carburo de silicio (SiC) y sulfuro de wolframio IV (SW2).

Se han preparado muestras con diferentes composiciones y se ha llevado a cabo el estudio de sus propiedades térmicas (DSC), caracterización estructural (WAXS) y estudio de propiedades eléctricas (BDS). Asimismo, se han obtenido nanocompuestos mediante la combinación de aditivos con diferente dimensionalidad esto es, sistemas híbridos formados por SWCNT (1D) y GNP (2D) en los que se ha podido constatar una sinergia entre ambos aditivos. Por otra parte, hemos iniciado un plan de investigación encaminado a desarrollar nuevos materiales polímeros basados en recursos biológicos renovables como son ácido láctico y furfural.

Grupo de BIOFÍSICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES: SIMULACIONES Y EXPERIMENTOS

Una nueva visión de la conformación y dinámica macromolecular en modelos moleculares de polietileno

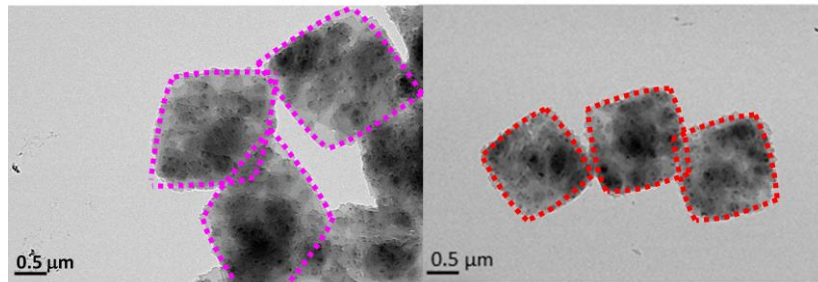
Se han realizado simulaciones de dinámica molecular sobre la conformación macromolecular y la dinámica de fusión para polímeros modelo de diferentes pesos moleculares. Los modelos seleccionados son dos: i) polibutadienos hidrogenados con un contenido de 2% de ramas de etilo y ii) polietileno lineal. La densidad y la rigidez de la cadena están claramente afectadas por el peso molecular y la presencia de ramas de etilo. Además, los resultados obtenidos de las simulaciones respecto al tamaño molecular y, más notablemente, la dinámica de la cadena, se adaptan perfectamente a los experimentos de dispersión de neutrones realizados en polibutadienos hidrogenado. Observamos una contracción de la cadena polimérica y dinámica más lenta para el polibutadieno hidrogenado con respecto a la cadena lineal de la misma longitud molecular. Usando las definiciones de Likhtman, McLeish, los valores obtenidos del tiempo de relajación entre enmarañamientos (τ_e) y el diámetro del tubo (a) están de acuerdo con los datos experimentales disponibles (tanto por reología como neutrones "Spin Echo"), así como con los obtenidos en las simulaciones disponibles en la literatura. Por último, se observa un muy buen acuerdo entre simulaciones y experimentos en relación a los coeficientes de difusión y en función del peso molecular. Por lo tanto, existe una clara diferencia entre los resultados obtenidos para el polietileno ramificado y lineal, representando un efecto definitivo de la ramificación de cadena corta en las propiedades conformacionales y la dinámica de fusión de poliolefinas.

Simulaciones de grano grueso de la cristalización, fusión y engrosamiento cristalino de poliolefinas ramificadas

Se han estudiado, por primera vez, los procesos de cristalización de polietilenos con ramificación de cadena corta mediante simulación de grano grueso. Las temperaturas de cristalización y fusión siguen la tendencia lineal esperada con la inversa del espesor laminar (relación de Thomson-Gibbs). Los cambios observados en las líneas de cristalización y fusión con el tamaño del cristal, tales como líneas de fusión diferentes en función de la cantidad de ramificación corta, la emergencia de una línea de cristalización maestra y los posibles mecanismos de estabilización de los cristales son congruentes con las evidencias experimentales. Además, un proceso de fuerte engrosamiento laminar se obtiene para el modelo lineal a temperaturas por debajo del punto de fusión, que sigue la interpretación clásica en polietileno, con un aumento logarítmico del grueso del cristal con el tiempo. Sin embargo, para las muestras ramificadas el engrosamiento se ve impedido en el mismo grado de sobreenfriamiento. En los modelos ramificados las ramas de cadena corta están excluidas del cristal permaneciendo en las regiones superficiales y amorfas. Esto provoca la fijación de estas regiones, reduciendo al mínimo la difusión de la cadena en el cristal y dificultando el engrosamiento del mismo.

Interpretación de nuevos hábitos cristalinos en el polietileno

Se ha estudiado la morfología de cristales únicos de polietileno ramificado en colaboración con el Prof. A. Müller (IKERBASQUE, Universidad del País Vasco). Los monocristales obtenidos desde disolución diluida se han estudiado durante décadas, principalmente en el caso del polietileno (PE). Es bien conocido que los monocristales de PE obtenidos exhiben diferentes y complejas morfologías y hábitos. Sin embargo el efecto de la ramificación permanece inexplorado. A las temperaturas de cristalización (T_c) más altas la forma de los monocristales obtenidos en PE ramificado siguen siendo de tipo “lozenge” como en el PE lineal, pero con los bordes ligeramente curvos. Sin embargo, a medida que T_c disminuye se producen fuertes cambios en la relación axial, de manera que a la T_c más bajas los monocristales adquieren una forma cuadrada. Es la primera vez que se observa este fenómeno en el PE, y posiblemente sea resultado de las diferentes condiciones estéricas con que la cadena se adhiere al frente de crecimiento debido a la presencia de la ramificación.



Micrografías del hábito cristalino obtenido en un PE ramificado a dos temperaturas de cristalización distintas. La línea de puntos es el ajuste al modelo de Shcherbina y Ungar para el crecimiento de un frente asimétrico.

SIMULACIONES Y EXPERIMENTOS EN BIOMOLÉCULAS Y SISTEMAS BIOLÓGICOS

Análisis conformacional de aminoácidos polares de cadena corta mediante cálculos DFT

Se han llevado a cabo cálculos de mecánica molecular y cuántica en una serie de tripéptidos (GXG, donde X = D, N y C) como modelos de los estados desplegados de las proteínas. Los aminoácidos seleccionados, especialmente el ácido aspártico (D) y la asparagina (N), son conocidos por presentar importantes conformaciones promedio en áreas parcialmente permitidas del diagrama de Ramachandran, con importantes implicaciones en la formación de la proteína desplegada. En esta línea de investigación presentamos un procedimiento de muestreo conformacional en combinación con el cálculo de las constantes de acoplamiento J de RMN obtenida por un modelo DFT. Las observaciones experimentales de RMN pueden explicarse razonablemente en términos de una distribución en la que las conformaciones extendidas PP_{II} y β suman probabilidades por encima de 0.9. El análisis conformacional del ángulo diedro de la cadena lateral (χ_1), junto con el cómputo de las correspondientes constantes de acoplamiento J, ha revelado una preferencia por los rotámeros g^- y g^+ . Estas constantes pueden conectarse con la presencia de puente de H intermolecular y las interacciones carbonilo-carbonilo muestreadas en las conformaciones PP_{II} y β . Teniendo en cuenta estos resultados, se puede establecer que estos residuos presentan un comportamiento similar al de otros aminoácidos en pequeños péptidos, con respecto a la distribución de los ángulos diedros ϕ y ψ de la cadena principal, y de acuerdo con análisis experimentales de dipéptidos.

Estudio de los cambios electrostáticos superficiales durante la estabilización de cápsidas víricas del papiloma humano – HPV16

En colaboración con la empresa biotecnológica Sino Biological Ltd. (China) hemos examinado el proceso de estabilización de las cápsidas del virus del papiloma humano HPV16 por medio de diferentes técnicas que incluyen la dispersión de luz dinámica y estática, la microscopía electrónica de transmisión y la movilidad electroforética. Así, ha sido posible estudiar el proceso de agregación y maduración de la cápsida mediante el que se han obtenido partículas similares al virus en un período de tiempo de 48 horas. Los resultados de dispersión de luz estática apuntan hacia una inestabilidad coloidal clara en el sistema inicial. Este hecho está probablemente relacionado con interacciones electrostáticas repulsivas entre las partículas, y con valores absolutos muy bajos de movilidad electroforética y, por tanto, de la carga superficial neta. En esta etapa inicial, las interacciones repulsivas no son capaces de compensar a las que tienden a agregar las partículas. A medida que avanza el tiempo, se produce un aumento del tamaño de las partículas, acompañado de fuertes cambios en los valores absolutos de la movilidad electroforética y de la carga superficial neta, lo que sugiere un sistema coloidal estabilizado. Estos resultados son de gran interés para el estudio de los factores de estabilización de cápsidas víricas en el desarrollo de vacunas.

Estructura y dinámica temporal de las comunidades bacterianas asociadas a microhabitats del coral Oculina Patagónica

Es sabido que los corales contienen una microbiota diversa que juega un papel primordial en su fisiología y su salud. Se ha estudiado, en colaboración con la Universidad de Alicante y el Museo Nacional de Ciencias Naturales (MNCN-CSIC) la composición de la comunidad bacteriana del mucus, tejidos y esqueleto del coral escleractínico Oculina de dos

lugares del Mar Mediterráneo Occidental. El objetivo es entender cómo están relacionadas las condiciones ambientales y la estructura del microbioma del coral. Se han encontrado diferencias en las comunidades bacterianas de ambas poblaciones, relacionadas con las condiciones ambientales y el estado de salud de los corales. Estos resultados abren un nuevo punto de vista sobre el papel que juegan los patógenos en el desarrollo de las enfermedades de los corales.

Microfósiles en comunidades microbianas endolíticas del desierto de Atacama

En colaboración con el MNCN-CSIC se han examinado los microfósiles de las comunidades microbianas que colonizan las costas de sulfato cálcico en el desierto de Atacama en su entorno natural. A través de técnicas de microscopía electrónica de barrido, microanálisis (EDS) y espectroscopía Raman, se han detectado precipitados de carbonato de calcio alrededor de restos de algas criptoendolíticas debajo de la superficie de las costras. También se ha observado la presencia de restos de algas permineralizadas por minerales ricos en Mg-Si en el interior de las costras. Adicionalmente, los minerales ricos en Mg-Si permineralizan las sustancias extracelulares poliméricas de las comunidades de cianobacterias. Las observaciones indican que a pesar del entorno hiperárido, las condiciones microambientales son apropiadas para la formación de biomarcadores y fósiles microbianos de comunidades microbianas endolíticas.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

2B.1 THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Classical and Quantum General Relativity.
- Quantum cosmology.
- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Black holes.
- Theories of quantum gravity and multi-fractal geometry.
- Quantum field theory.
- Combinatorics.
- 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.
- Mesoscopic and strongly correlated systems.
- Quantum integrable models.
- Theoretical spectroscopy of molecular species relevant for astrophysics and atmosphere.
- Van der Waals interaction in ZIFs.
- Photodissociation of organic radicals.

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY:

GRAVITATION

During 2016, the Gravitation and Cosmology Group has continued the study of quantization techniques for fields in cosmology, and the application of these techniques for the investigation of cosmological perturbations and other scenarios of interest in relativistic astrophysics, as well as for analog systems in condensed matter physics. Part of the research has been devoted to the determination of criteria capable to ensure the uniqueness of the Fock quantization of fermion fields in cosmological spacetimes, therefore away from stationarity. This study of fermions generalizes previous works of the Group on the Fock quantization of scalar fields and tensor perturbations. Similarly to the situation that had been found for those scalar and tensor fields, although facing now a much richer complexity, these criteria turn out to select also an essentially unique dynamics for the fermion fields in this kind of curved spacetimes, leading to a natural separation between the cosmological background and field variables which evolve unitarily. For fermions, this separation is not a mere scaling of the field. We notice that the unitarity of the evolution guarantees the preservation of the quantum coherence of the fermions: no loss of information occurs for fermionic particles adapted to this notion of dynamics, for which the background dependence has been suitably extracted.

We have further progressed in the application of these uniqueness criteria by considering the Fock quantization of scalar fields in Bianchi I spacetimes. Again, we have proven that these criteria ensure the uniqueness in the choice of dynamics that respects unitarity, and of the Fock representation for the associated canonical commutation relations. This is the first time that our uniqueness criteria have been implemented in anisotropic spacetimes. The success of our proposal opens new avenues for the quantization of matter fields and perturbations on anisotropic scenarios in quantum cosmology.

Besides, we have combined these results on the Fock quantization in curved spacetimes with the hybrid approach introduced by our Group in Loop Quantum Cosmology, with the aim at analyzing the consequences of the simultaneous quantization of the matter fields and of the geometry in the formation and development of cosmological perturbations. We have extracted modified equations for the cosmological perturbations, that retain these quantum gravity effects and that might lead to falsifiable predictions, e.g. in the cosmic microwave background. Moreover, we have generalized our study to quantization schemes in cosmology other than Loop Quantum Gravity. In this way, we have constructed a generalized framework for our hybrid approach which has been shown consistent and capable to incorporate all quantum geometry modifications to the primordial spectrum of perturbations, beyond the typical semiclassical approximations employed in Quantum Cosmology.

Another issue that we have investigated is whether the dominant ultraviolet effect in the gravitational collapse of massive stars may be a black-to-white hole transition. Studying the crossing of null shells on geometries describing this transition, we have obtained the conditions for the so-called Eardly instability to develop. Transitions with long characteristic time scales are pathologically unstable, while geometries with short characteristic time scales are robust against perturbations, so that the corresponding processes could take place in real astrophysical scenarios. We have also constructed a tensorial description of particle perception in black-hole physics and made a clear separation between the Hawking radiation part and the Unruh contribution to a detector's measurement in a black hole spacetime; in view of this we have argued that slowly crossing a black hole horizon may not be possible. From a different point of view, we have studied the thermalization process for particle detectors in the Unruh effect and also the possibility of timelike information broadcasting in cosmological scenarios with massless fields. Finally, we have analyzed how physical symmetries give rise to emergent gauge symmetries considering the simple case of a vector field.

In parallel, the so-called multi-fractional theories (theories of quantum gravity where spacetime structure is multi-fractal) have experienced a notable boost thanks to our effort. On one hand, we have formulated for the first time a definition of Lorentzian fractal geometry and a classification of all theories of quantum gravity according to the type of dimensional flow characterizing them. We have rigorously built the Standard Model of strong and electroweak interactions in two multi-fractional theories (with weighted derivatives and with q -derivatives), starting from the symmetries of the action. This completed the formulation of these two theories. On the other hand, we were able to obtain an impressive number of direct observational constraints on the fundamental scales of multi-scale geometries, coming from quantum electrodynamics (variation of the fine-structure constant and Lamb shift effect), weak interactions (muon lifetime), astrophysical observations (gravitational waves and gamma-ray bursts) and from the Cosmic Microwave Background (CMB). We compared multi-fractional theories with traditional quantum gravities and showed that the gravitational waves observed by LIGO can constrain efficiently, by themselves, the parameter space of such theories, while the same observations can say very little about the energy scale of quantum gravities. By obtaining strong bounds on the scales of the geometric measure, we thus completed the phenomenology of two of the three multi-fractional theories.

The discovery of gravitational waves of astrophysical origin by LIGO allowed us to reassess the observability of quantum-gravity effects. Such effects are encoded in modified dispersion relations that affect the propagation of geometry waves in spacetime. Unfortunately, LIGO observations do not place strong constraints on the energy scale at which we should start seeing quantum-gravity effects. Our Group has obtained this result both for a non-local model by Padmanabhan and in more phenomenological cases. Moreover, our bounds permitted the first comparison, at the phenomenological level, between quantum-gravity theories and multi-fractional theories.

Last, we concluded the rigorous study of dimensional flow, the change of the effective dimension of spacetime (from the topological dimension 4 at large scales to a smaller value at Planck scales) observed in virtually all quantum gravities, both in continuous and in discrete approaches. We also defined the spectral dimension in the framework of field theory, thus solving some conceptual problems arising in the traditional interpretation of the spectral dimension in terms of a diffusion process. Our works consolidate the theoretical framework used in the study of dimensional flow in the literature of quantum gravity.

Within the context of the rigorous study of the Hamiltonian formulation of field theories, we have advanced in two different directions. On one hand we have paid attention to the interplay between internal gauge symmetries and diffeomorphisms in parametrized models, in particular electromagnetism. Although parametrized electromagnetism has been considered in the past by a number of authors, a satisfactory understanding of its most salient features, in particular

its symmetries, was lacking. This problem can be solved in a satisfactory way by using the geometric Hamiltonian methods developed by Gotay, Nester and Hinds in the late seventies. In this particular example we have found a very interesting interplay between gauge invariance and time evolution. Specifically, we have shown that non-trivial dynamics can only be found in the sector of the constraint hypersurface where the Gauss law is satisfied. Outside this sector time evolution is frozen and the system behaves in a trivial way. This type of behavior can also be understood, with some technical difficulties, as originating in a bifurcation of the more familiar Dirac constraint algorithm (a similar situation can be found in the study of higher dimensional Chern-Simons models). In fact, the geometric methods that we use prove to be both, economic and effective; certainly better than the standard approaches.

A second system that we have analyzed in detail is the parametrized scalar field defined on bounded spatial regions. The main issue of interest in this setting is the implementation of different types of boundary conditions. In fact an important class of them (the Robin boundary conditions) has resisted previous attempts to be implemented and consistently understood. In this example the main technical issue originates in the fact that the standard (i.e. non-geometric) treatments are not suitable to deal with manifolds of different dimensionality (in this case the bulk and the boundary of spacetime). The use of more abstract geometric methods, with their explicit coordinate independence, allowed us to circumvent the technical problems associated with the presence of boundaries. The final formulation that we found for the model is a consistent extension of the results known for the non-parametrized system subject to different families of boundary conditions (Dirichlet, Neumann and Robin). As in the example of the electromagnetic field there is an interplay between certain constraints relevant only on the spatial boundary and non-trivial time evolution.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Weak-interaction rates in astrophysical environments

Stars are unique laboratories where all the interactions in nature come into play to determine the different stages in the stellar evolution. This comprises the energy generation as well as the nucleosynthesis of elements. Whereas the main sequences of the stellar evolution and the majority of the elements with mass number below $A=60$ are produced by hydrostatic burning mediated by the strong and electromagnetic interactions, weak interactions grow in importance in later stages, when the density and temperature in the core become larger, increasing the Fermi energy of the degenerate electron gas and then favoring electron captures. In fact, it is a well established feature that weak β -decay and electron-capture (EC) processes are very important mechanisms to understand the late stages of the stellar evolution, playing a critical role to determine both the presupernova stellar structure and the nucleosynthesis of heavier nuclei.

An accurate understanding of most astrophysical processes requires necessarily information from nuclear physics, which provides the input to deal with network calculations and astrophysical simulations. Due to the extreme conditions of density and temperature that hold in stellar scenarios, most of the nuclear properties cannot be measured directly. Therefore, the Gamow-Teller (GT) strength distributions must be estimated in many cases by model calculations. Obviously, nuclear physics uncertainties will finally affect the reliability of the description of those astrophysical processes. In this work we have studied weak-decay rates at different density and temperature conditions holding in stellar scenarios. This study is performed on a set of pf -shell nuclei representative of the constituents in presupernova formations. The theoretical formalism for the nuclear structure calculation is a proton-neutron quasiparticle random-phase approximation (pnQRPA) approach based on a self-consistent Hartree-Fock deformed mean field with Skyrme interactions and pairing correlations in the BCS approximation. Residual spin-isospin interactions are also included in the particle-hole and particle-particle channels. The structural evolution in the various isotopes and their equilibrium shapes are obtained from their energy-deformation curves. Our calculations are able to reproduce the main features of the GT distributions extracted in these nuclei from charge-exchange reactions. Comparison of our results for the EC rates with Shell Model calculations and other QRPA results shows that, in general, the agreement with experiment is comparable to the Shell Model. The contributions from excited states in the parent nucleus that can be thermally populated in the stars have been explicitly calculated in several odd- A nuclei, where quasiparticle states are found at very low excitation energies. The contributions of the excited states to the rates depend on the density and temperature through the population of these states and their phase factors, but depend also on their GT structure. All in all, we find quite similar results for the total rates and for the rates considering only the contribution from the ground states fully populated. The reason is that population of excited states leads to a depopulation of ground states and both effects are compensated to some extent when the GT strength distributions are not very different from each other.

We have also studied double beta decay processes with two-neutrino emission. The calculations have been compared with the experimental information available on the single-beta decays of the two branches in the process, which is extracted from charge exchange reactions, as well as with the experimental half-lives of the double-beta process. The final goal is to fine tune the theoretical models in order to account reliably for the neutrinoless process, not yet observed, which will provide valuable information about the neutrino nature and its absolute mass. In particular, we have studied those processes in the following partners: (^{76}Ge , ^{76}Se), (^{116}Cd , ^{116}Sn), (^{128}Te , ^{128}Xe), (^{130}Te , ^{130}Xe) and (^{150}Nd , ^{150}Sm) with intermediate nuclei ^{76}As , ^{116}In , ^{128}I , ^{130}I y ^{150}Pm , respectively.

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

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

More specifically, during the last months our work has been focused in two main issues: The first one concerns the triple-alpha process and its reaction rate at very low temperatures. The fact that at such low temperatures the energies involved are far below the lowest 0^+ resonance in ^8Be implies that a sequential description through that particular two-body resonance is not obvious. In fact we have found that a direct capture description of the process, without populating any intermediate two-body state, could increase the reaction rate by up to 7 orders of magnitude for a temperature of 10^7 GK. We have also studied alpha-alpha bremsstrahlung cross sections, which is an essential issue to be understood in order to extend the same kind of analysis to the same gamma emission processes in a three-alpha system. The second main topic refers to the description of 1+2 reactions by use of the recently derived two integral relations. We have found the method to be very successful in order to describe processes below the two-body breakup threshold, not only for elastic processes, but also for inelastic and transfer reactions. Application of the same method for energies above the breakup threshold is the obvious next step. This has been achieved very recently, and in particular it has been applied to investigate neutron-deuteron collisions as well as reactions involving three ^4He atoms at very low temperatures, of the order of the μK .

Quantum chaos

We study the spectral fluctuations of the 208Pb nucleus using the complete experimental spectrum of 151 states up to excitation energies of 6.20 MeV recently identified at the Maier-Leibnitz Laboratorium at Garching, Germany. For natural parity states the results are very close to the predictions of random matrix theory (RMT) for the nearest-neighbor spacing distribution. A quantitative estimate of the agreement is given by the Brody parameter ω , which takes the value $\omega=0$ for regular systems and $\omega \approx 1$ for chaotic systems. We obtain $\omega=0.85$ which is, to our knowledge, the closest value to chaos ever observed in experimental bound states of nuclei. By contrast, the results for unnatural parity states are far from RMT behavior. We interpret these results as a consequence of the strength of the residual interaction in 208Pb , which, according to experimental data, is much stronger for natural than for unnatural parity states. In addition, our results show that chaotic and nonchaotic nuclear states coexist in the same energy region of the spectrum.

CONDENSED MATTER THEORY

Quantum integrable models

The BCS model describes a fermionic system interacting with a pairing force with constant matrix elements. Bardeen, Cooper and Schrieffer proposed this model for the microscopic study of superconductivity and it has been solved exactly by Richardson. Later on, it has been shown that the model Hamiltonian is quantum integrable, allowing for the study of the exact many-body wave function from the normal phase dominated by pairing fluctuations, to the superconducting phase with a condensation of Cooper pairs. Guided by the form of the wave function, we study the BCS approximation with number projection (PBCS) in a basis of particles and holes and we show its relation with the Coupled Cluster Theory (CCT). While the first approximation appropriately describes the superconducting phase in a finite Fermi system, the second approximation describes correctly the pairing fluctuations in the normal phase. We could then establish the range of validity of the PBCS approximation in non-superconducting mesoscopic systems. On the other hand we could test the precision of CCT in this phase. This study allowed us to present a new approach based on polynomial similarity transformation. In the weak coupling limit, this polynomial becomes an exponential leading to the CCT wave function. In the opposite limit of strong correlations, the polynomial transforms into a Bessel function giving rise to the PBCS wave function. In between both limits we interpolate using a single parameter determined variationally. This approach produces highly accurate wave functions with energy errors that are smaller than 1% across all interaction strengths.

3D topological semimetals

During 2016 we have continued the investigation of 3D Dirac and Weyl semimetals, which have attracted lately much attention given the interesting properties they can show as higher-dimensional analogues of graphene. We have studied in particular the topological protection of the surface states in Weyl and nodal-line semimetals by characterizing them as evanescent states when the band structure is extended to complex momenta. We have found in this way a sequence of

exceptional points (that is, branch points with zero energy in the complex spectrum) allowing us to identify the set of zero-energy surface states with complex momentum signaling the decay into the 3D semimetal. From this point of view, we have seen that Weyl and nodal-line semimetals can be classified in two types, depending on whether the branch cuts run in parallel crossing the real axis of complex momentum (leading to short penetration with oscillatory behavior of the evanescent states) or they are all disposed along the imaginary axis (corresponding to long penetration with purely exponential decay of the states). The stability of the surface states stems in our approach from the complex structure that develops around the exceptional points, with a topological protection which is based on the fact that the branch cuts cannot be closed by small perturbations. We have checked this property when nodal-line semimetals are placed under circularly polarized light, where we have observed that the exceptional points survive the effect of such a perturbation, though appropriate boundary conditions for zero-energy surface states cannot be satisfied in general due to the breakdown of time-reversal invariance by the radiation field.

Furthermore, we have studied the interplay between the effects of disorder and interactions in 3D Dirac and Weyl semimetals. We have focused in particular on the impact that the disorder may have on the critical behavior that those semimetals develop from the long-range Coulomb interaction. We have shown that short-range disorder potentials (correlated disorder) do not destabilize the non-Fermi liquid phase of these systems at strong interaction strength, although they induce in general a decrease of the Fermi velocity that competes with a significant screening of the interactions. As a consequence of that, we have found a line of unstable fixed points (at weak interaction strength) where the effective couplings of the disorder and the interaction remain scale invariant. We have seen that, at one side of the line (in the phase where screening effects are dominant), the system flows at low energies to a regime with regular Fermi liquid behavior. At the other side of the line, the disorder plays the dominant role to drive the system towards a phase with vanishing effective Fermi velocity of the electron quasiparticles. We have also found that, for intermediate interaction strength, screening effects always prevail, stabilizing a semi-metallic phase with suitably renormalized parameters of the electron quasiparticles.

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

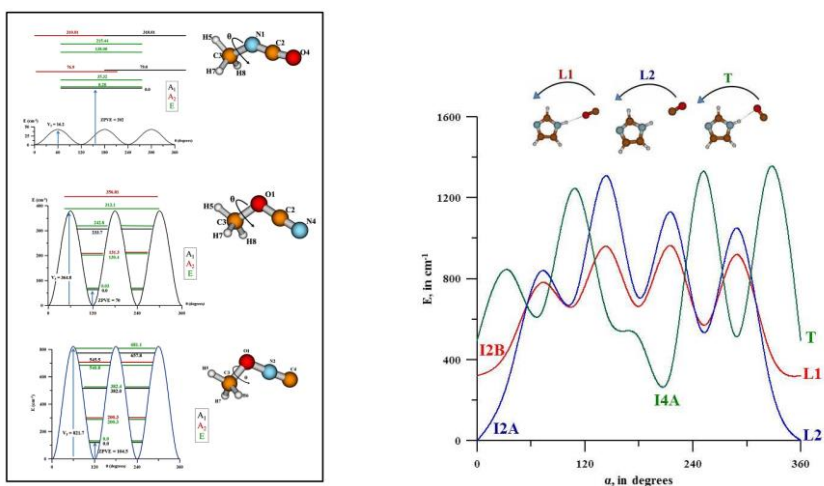
The research group employs highly correlated *ab initio* methods to characterize molecular species and chemical processes of astrophysical interest, to describe new materials with application to CO₂ capture and storage, and to determine Rydberg and dissociative electronic states of organic radicals.

During the year 2016, we have performed studies of molecular systems of astrophysical interest within 2 sub-lines of research: molecular spectroscopy of non-rigid prebiotic molecules, structural and spectroscopic characterization of semi-rigid species and determination of properties in non-reactive inelastic collisions at very low temperatures. Always we use as a basic tool, high-level *ab initio* methods to determine molecular structures and potential energy surfaces. Based on these tools and using our codes ENEDIM and FIT-ESPEC, rovibrational spectroscopic properties are predicted. All systems are of interest for the study of the chemical properties of circumstellar and interstellar gas phase regions and planetary atmospheres.

Since 2004, we have made very detailed and comprehensive studies aimed to the characterization of carbon chains of astrophysical importance gradually increasing the complexity of the systems. These chains are considered relevant isolated species and intermediates of formation processes of large molecules such as PAHs and Fullerenes. Very accurate methods have been used to characterize small chains. Initially we studied pure chains type C_n with a reduced number of atoms (4, 5) which have no permanent dipole moment and are likely to be detected with infrared techniques. In the far infrared region, they can be seen through their bending modes. During 2016, we have carried out an exhaustive study of the neutral, anionic and cationic forms of C₆N in collaboration with researchers from the University of King Saud of Ryad. In collaboration with the Laboratory of Astrophysics of the Rennes Institute of Physics we explored anions of small carbon chains. These species of low stability have permanent dipole moment and therefore are observable through radio astronomy. Taking into account the evolution of the electronic states of low energy throughout the processes of formation and destruction, we have proposed a general rule that predicts the detectability of anions in astrophysical sources. For all the studied carbon chains, we have characterized structures and potential surfaces for the first electronic states, as well as rovibrational properties including anharmonic effects. We predicted possible channels of isomerization, conical intersections and rovibronic effects.

The new radioastronomical observatories will allow the detection of new molecules and new isotopic varieties if their rotational spectra in the millimeter and sub-millimeter regions are recorded and analyzed at the laboratory level. Highly correlated *ab initio* calculations allow determine molecular structures, as well as to obtain initial sets of spectroscopic parameters that can facilitate the assignments of these spectra. Special interest show the calculation aimed to the spectroscopic characterization of non-rigid prebiotic species that present vibrational levels likely to be populated at very low temperatures. These are suitable of been detected in vibrational excited states in star formation areas. During 2016, especial attention was given to organic species that present intramolecular hydrogen bonds, like as ethylen-glycol. In

collaboration with researchers of the University of Lille we are performing studies on the detectable isomers of methyl isocyanate.



Finally, within the environment of Marie Curie FP7-CAPZEO action, we are conducting studies of the interaction of CO₂ and water with imidazoles. The aim is to predict the ability of materials type ZIF (Zeolitic Imidazolate Frameworks) for the caption and storage of atmospheric species. Molecular calculations (interaction potentials and structures) take advantage in future studies of simulation of solids. During 2016, we emphasized on the problem of the competition between CO₂ and other greenhouse effect gases (CO, SO₂, NH₃) for their capture in ZIF's.

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.
- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Surface Spectroscopies.
- Surface Plasmon Photonics and Metamaterials.
- Biospectroscopy.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Biological applications of vibrational spectroscopy.

RESEARCH SUBLINES:

- Experimental studies of light nuclei close to and beyond the driplines.
- Beta decay studies of dripline nuclei.
- Study of the nuclear break up mechanism by multiparticle detection.
- R&D for FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Study of the structure and dynamics of halo nuclei.
- Direct nuclear reactions.
- Magnetic moment measurements in exotic nuclei using radioactive ion beams.
- Nuclear Instrumentation.
- Computing tools in Experimental Nuclear (R3BRoot).
- Data Analysis tools.
- Nuclear Physics experiments for FAIR.
- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Advanced instrumentation development for neutron sources.
- Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Computational methods in gravitational physics.
- Black hole analogs in condensed matter.
- Strongly correlated and mesoscopic systems.
- 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 and biondiagnosis.
- Localized Plasmon resonances in metal nanostructures (nanoantennas).
- Metamaterials with HRI dielectric materials.
- Semiconductor Nanowire Photonics.
- Detection of infrared and Raman spectroscopic markers for diagnosis of neurodegenerative and neoplastic diseases.
- Molecular structure of proteins and lipids in functional food.

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.

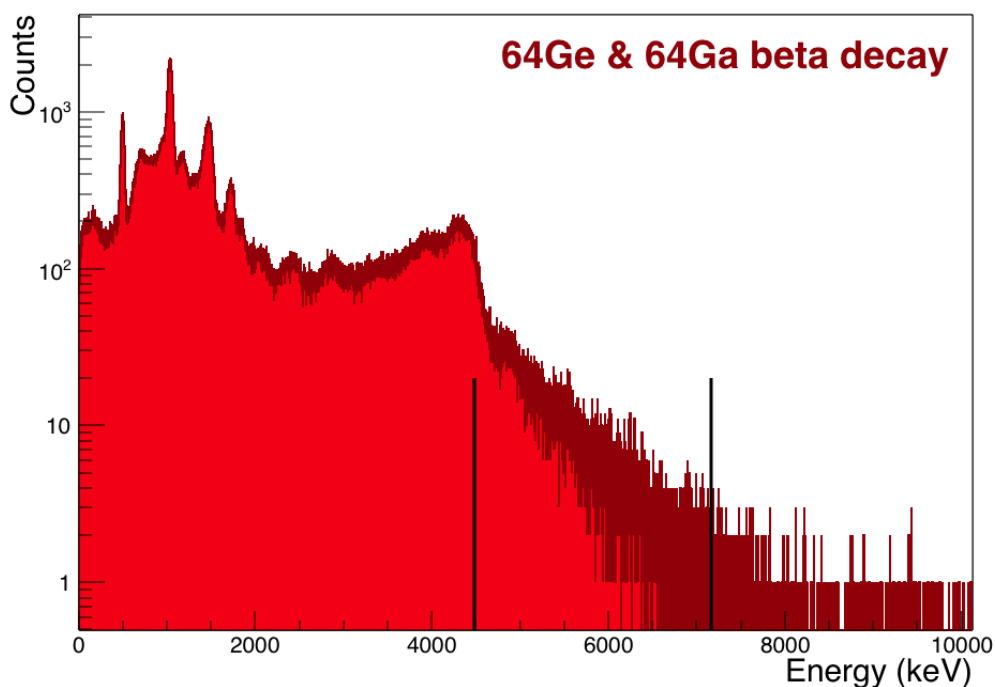
- Electronic and mechanical design of experimental set-up.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Calorimetric techniques.
- Gas adsorption techniques.
- Absorption techniques.
- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- IR Spectroscopy (Normal, FTIR, micro IR and SEIR).
- Visible-UV Spectroscopy.
- IR and Raman Spectroscopy of two dimensional correlations by H/D isotopic exchange.
- Fluorescence Spectroscopy.
- Transmission and Scanning Electron Microscopy (TEM, SEM).
- Theoretical and mathematical physics.
- IR Spectroscopy (FTIR).
- Raman Spectroscopy
- Multivariate Statistical Analysis.
- Time- and space-resolved Imaging techniques

RESEARCH ACTIVITY:

IS570 EXPERIMENT: BETA DECAY OF THE N=Z, RP-PROCESS WAITING POINTS: ^{64}Ge , ^{68}Se AND THE N=Z+2: ^{66}Ge , ^{70}Se FOR ACCURATE STELLAR WEAK-DECAY RATES @ ISOLDE
(FPA2012-32443: Enrique Nácher, Olof Tengblad, Irene Marroquín, ÁngelPerea)

The main goal of this project is to measure the beta decay of some neutron-deficient isotopes of Se and Ge for their importance in astrophysical calculations. In particular, the beta decay ^{70}Se , ^{68}Se , ^{66}Ge and ^{64}Ge and the ratio EC/beta⁺ in these decays can have some influence in the luminosity curve of type I X-Ray Bursts. The experimental technique proposed is the Total Absorption Spectroscopy (TAS) and the ideal place to do it is at ISOLDE since there is good production of the isotopes of interest and there is a permanent TAS setup called Lucrecia.

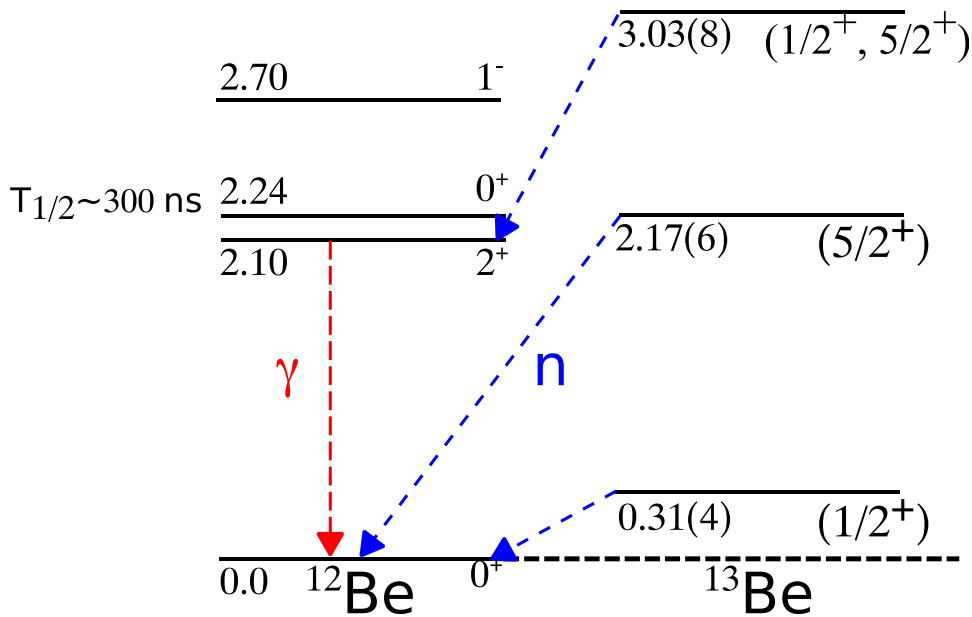
With this aim we went to ISOLDE in May-2016, setup the experiment and tried to measure for 5 days the decays of the light Se isotopes. However, there was very little production/extraction of the molecular form SeCO and it was heavily contaminated with GeS. This is why we instead measured the light Ge isotopes. The beta decay of $^{64,65,66}\text{Ge}$ and their daughters $^{64,65,66}\text{Ga}$ were measured. These data are now under analysis.



Beta decay of ^{64}Ge and its daughter ^{64}Ga measured with the TAS spectrometer. The two vertical lines represent the Q_{EC} value of the two decays respectively.

EXPERIMENT S393 R3B@GSI: STUDY OF NEUTRON RICH NUCLEI BEYOND THE DRIP-LINE*(FPA2012-32443: PhD student FPI2010 G. Ribeiro, E. Náchter, Olof Tengblad)*

The PhD thesis of our former student G. Ribeiro was focused on the analysis of this experiment aimed at the study of the structure of ^{13}Be , an unbound nucleus at the neutron drip-line. The thesis was defended in summer 2015 and since then we have been working on presenting and publishing the results. Having the analysis definitely finished in 2015, during 2016 we have focused on the discussion and interpretation of the results. In particular, thanks to the novel detection of gamma rays in the reaction of interest, we have given an interpretation to the structure of ^{13}Be that settles a longstanding discrepancy between the data of different laboratories. Now the article is written and will be sent for publication to an ISI journal.



Level scheme of ^{13}Be relative to the ground state of ^{12}Be . The blue arrows represent the neutron emissions whereas the red arrow is the only gamma transition observed in our experiment.

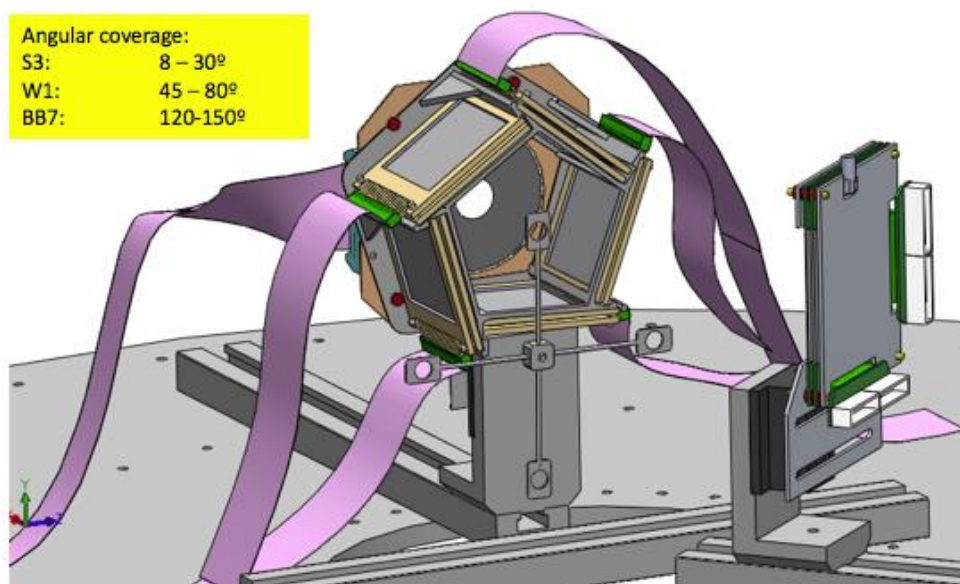
EXPERIMENT IS561: Transfer reactions at the neutron dripline @HIE-ISOLDE*(FPA2015-64969-P: Olof Tengblad, Irene Marroquín, ÁngelPerea, MJG Borge)*

In spite of the intense work done over the last 30 years concerning the halo nuclei their excited states, normally unbound, are highly debated. Most studies have been performed at relativistic energy. The start of HIE-ISOLDE allows us now to explore the excited states of halo nuclei and the neighbouring resonances via transfer reactions. The limitation on the maximum beam energy at REX-ISOLDE (2.5-3.2 MeV/u) has restricted transfer experiments to light elements and only low excitation. The increase of beam energy in HIE-ISOLDE (5-10 MeV/u) will open new possibilities.

The final goal of IS561 is the (t,p) two-neutron transfer to ^9Li populating the ground state of ^{11}Li as well as low-lying resonances. We aim at detecting the charged particles from the transfer reactions as well as neutrons coming from the decay of possible ^{11}Li resonances, for this we need a reaction energy of 7.5 MeV/u at least.

HIE-ISOLDE was 2016 in start-up phase, we had to install new equipment on the beamline, and there was not yet sufficient energy for the reaction of interest. We, thus, went for the simpler already tried reaction (d,p) in order to verify the set-up. The new set-up was installed and we took data at the record HIE-ISOLDE energy of 6.8 MeV/u. Several ideas for improvements were identified; mainly on the auxiliary detectors for beam-observation and for the target mechanism in order to be able to manipulate the targets from the outside.

In 2017 the experiment will be retaken using the tritium target and at a beam energy of 7.5 MeV/u.



Schematic view of the IS561 experimental set-up. The reaction target is fixed to the motorized windmill, in the centre of the figure. The reaction products are, in the forward direction detected by Double Sided Si strip detectors; Circular strip detector S3 covering 8-30 degrees, 5x ΔE -E telescopes each composed by a thin (60 μm) DSSD (256 pixels $3 \times 3 \text{ mm}^2$) and a 1500 mm Si-PAD detector, covering 45-80 degrees and finally in the backward direction a BB7 telescope, where the DE has 32×32 strips (1024 pixels of $2 \times 2 \text{ mm}^2$) 60 mm thick backed by a 1500 mm PAD, covering 120-150 degrees.

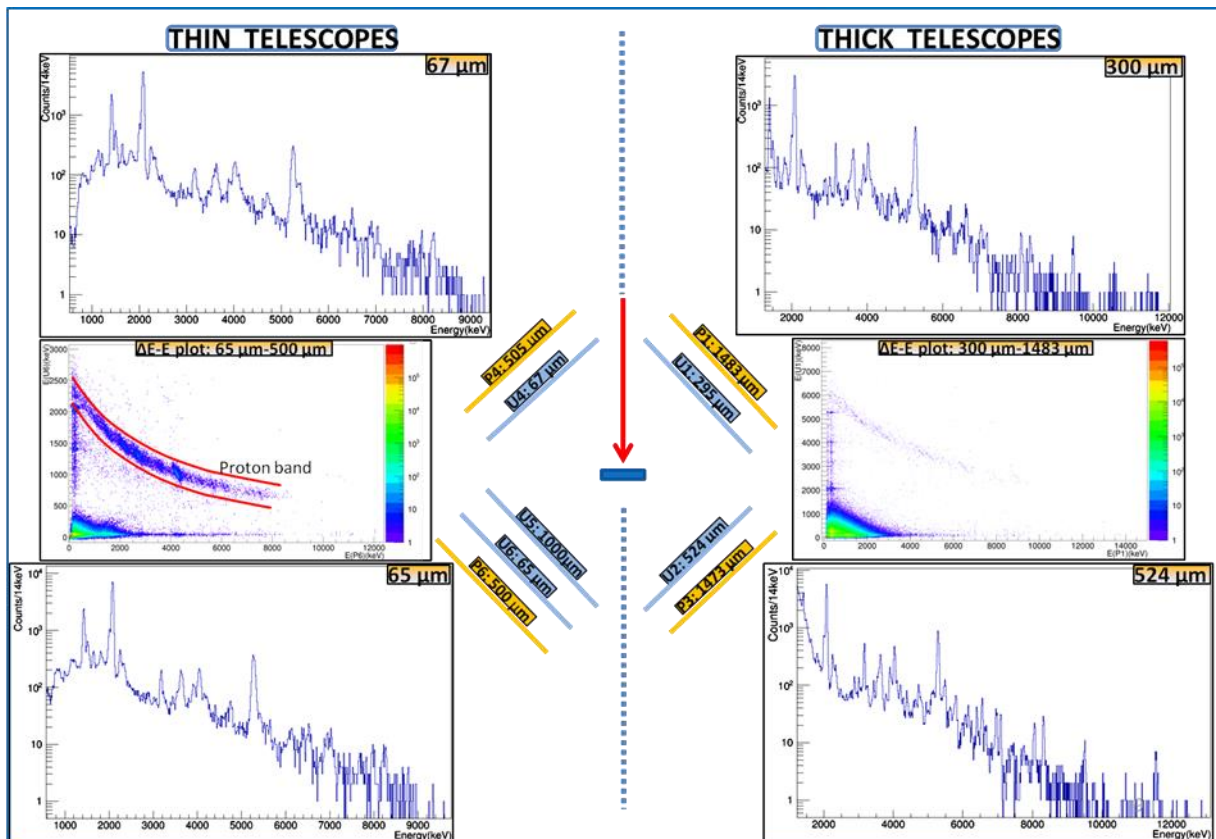
IS577 EXPERIMENT: NUCLEAR STRUCTURE STUDY OF ^{31}Ar @ ISOLDE

(FPA2012-32443: PhD student FPI2013 Irene Marroquín, Olof Tengblad, Enrique Nácher, ÁngelPerea)

Our isotope of interest in this study is ^{31}Ar . It is a light exotic nucleus, situated at the proton drip-line. It is a β -delayed proton emitter with high Q_{β} -value and low proton separation energy. Therefore, many channels are open, following its β -decay; emitting one proton, two protons and even three protons. The goals of our work are the identification of the $\beta 2p$, $\beta 3p$ channels and to study the decay from the Isobaric Analog State, IAS in ^{31}Cl .

The ISOLDE Decay Station (IDS), CERN, Geneva, Switzerland, is a new permanent station devoted to β -decay measurements. It consists of 4xHPGe clover detectors for γ -ray detection surrounding the experimental chamber. This chamber can be adapted and adjusted for different kind of experiments, such as fast-timing, neutron time of flight or particle emission. In our experiment, we used the MAGISOL Si-Plugin chamber, designed and tested in our group (IEM-CSIC). It contains an array of 5 Double-sided Silicon Strip Detectors (DSSD, 5x5 cm, 16x16 strips) backed by unsegmented silicon-pad detectors (PAD) in ΔE -E configuration for β and charged particle detection. This setup is very compact with high efficiency (solid angle 45% of 4π), low cut off energy (150 keV), also good energy and angular resolution (25 keV, 3°).

In the analysis of this experiment, levels in the proton daughters (^{30}S , ^{29}P) are studied: we observed high fragmentation of the IAS which populates all levels in ^{30}S . Coincidences of p - γ , and p - p allow to clearly identify levels near the proton threshold in ^{30}S and finally we obtain for the first time a clear evidence of $2p$ - γ coincidences. The ongoing analysis is the topic of the PhD thesis of Irene Marroquín.



1p spectra from telescopes are shown together with the 2d ΔE -E plots and the array of detectors DSSSD (U1-U6) and PAD (P1-P6) used in the experiment. The spectra show very good energy resolution at low and high energies. This means that p - γ , $2p$ - γ and p - p coincidences are much improved thus analysis of $\beta 2p$ and $\beta 3p$ channels is very promising (work in progress).

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.

Relying in high quality samples of graphite oxide (GO) synthesized by Dr. Fabienne Baroso Bujans at the Centro de Física de los Materiales in the Basque Country, we have identified, using neutron scattering techniques, ordering phenomena and 2D phase transitions in the intercalation of 1-Propanol into GO. Apart from the fundamental interests of studying ordering phenomena induced by “weak” Hydrogen-bridge interactions under 2D confinement, eventually we have got a new pillared GO compound with good thermal stability relevant for the applications.

We have also started a collaboration with Dr. M. P. de Lara Castells from the Instituto de Física Fundamental in Madrid, oriented to the development and application of precise multiscale numerical simulations driven by “ab initio” calculations of physical-chemical processes at the nanoscale.

ADVANCED INSTRUMENTATION DEVELOPMENT FOR NEUTRON SOURCES

During 2016 we have presented studies about the deleterious effects of incident neutron flux onto the neutron guides used at the present neutron sources. The results are of a great practical value since they identified the causes of the breakdown of such guides observed during standard operation at the neutron scattering large facilities.

NANOFABRICATION

The nanofabrication of nanostructures with advanced optical properties was one of the main objectives of our group during 2016. The interaction of appropriated light with plasmonic nanoparticles (NPs) leads to a high intensification of the local electric field, which is the basis for the molecular detection based on Raman and fluorescence. This is why during the past year we have developed methods of synthesis of nanoparticles with interesting applications both in spectroscopy and catalysis. The main purpose of this task was the fabrication of nanoscopic systems with specific morphological properties leading to high electromagnetic field intensifications. The strategy for obtaining these systems has been two-fold: a) The preparation of anisotropic NPs with special morphologies leading to high field enhancement, as nanostars, and b) the association of spherical nanoparticles by using bifunctional molecules leading to interparticle cavities highly effective in enhancing Raman scattering (hot spots). Progress has been also made to develop protocols for the preparation of silver nanostars with tailored morphology, which were not prepared so far in silver. These nanoparticles have a larger number of advantages in relation to gold, since Ag is more efficient in Surface-enhanced Raman scattering (SERS) and Surface-enhanced fluorescence (SEF), because of the greater enhancement factor, and because of their wider range of activity, as the AgNPs exhibit plasmon resonances in the visible spectrum and the near-infrared. The protocols of preparation of Ag nanostars were aimed at avoiding the use of surfactants, which are normally used in the preparation of Au nanostars, since these substances prevent the approach of the analyte to the surface, thus decreasing the efficiency of these systems in spectroscopy. On the other hand, hollow Au/Ag nanostar-like NPs were also prepared.

SURFACE FUNCTIONALIZATION: FABRICATION OF NANOSENSORS

The functionalization of metal surfaces obtained by self-assembly of organic molecules was a fundamental work line in our group during 2016. The functionalization can highly increase the sensitivity and selectivity of the fabricated nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the obtained metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. Moreover, these molecules may increase the biocompatibility of plasmonic metal NPs, which is an issue of great interest in medical applications, and may allow the control of the self-assembly of these systems.

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

The functionalization experiments of NPs aliphatic and aromatic dithiols of different length was completed. These bifunctional molecules perform a double function: a) the nanoparticle coupling with formation of interparticle junctions

where a large intensification of the field occurs, and b) the creation of intermolecular cavities that allow the assembly of analytes. The detection of analytes is then possible because then they are concentrated in the interparticle cavities where a large intensification of the field is achieved. The NPs linking induced by dithiols was also investigated by plasmon resonance and transmission electron microscopy (TEM). Functionalized NPs were successfully applied to the detection of organochlorine pesticides such as endosulfan, aldrin dieldrin and lindane. In order to do this, an optimization of the linker adsorption was previously made at different experimental conditions (surface coverage, excitation wavelength, metallic substrate), and the sensitivity and selectivity of this detection was tested by analysis of the adsorption isotherms. Moreover, a similar study was carried out for aromatic dithiols using dithiols with different lengths (bearing one or two benzenic rings between both SH groups). The preliminary results seen with these compounds demonstrate that a polymerization of molecules occurs on the surface by the formation of disulfide bonds. These studies were performed in the frame of the cooperation that our group maintains with researchers of the PJ Safarik University in Kosice (Slovakia).

POLLUTANT DETECTION

During the last year, we have carried out the application of the SERS technique in the detection of pollutants that do not need any surface functionalization. This work was accomplished in collaboration with researches of the Universidade Estadual Paulista (UNESP) in Presidente Prudente (Brazil) and from the Universidad de Málaga (with the latter group we maintain a collaboration through an Associated Unit). We have focused our attention on the pesticide carbendazim. This molecule is very important under the environmental point of view, since it is employed in agricultural practices in many countries of the world. Therefore, the detection of this compound is an important issue to prevent human health risks. This investigation consisted in the adsorption study on the surface through Raman, IR and plasmon resonance, assisted with the vibrational normal modes analysis with DFT of the corresponding metallic complexes.

Simultaneously, we have made progress in the study of triazine pesticides, in particular atrazine and prometryn. These compounds are frequently used in all countries, but mainly in Brazil. This is why this research line was carried out as well in collaboration with researchers from the Universidade Estadual Paulista (UNESP) in Presidente Prudente (Brazil). The preliminary results demonstrated that these compounds undergo an abiotic degradation consisting in the hydroxylation and dealkylation of periferic groups that increases their solubility in water. The study carried out for triazine pesticides is based on the identification by SERS of the degradation products and the degradation mechanisms.

BIOMOLECULE/NANOPARTICLE INTERACTION

The interaction of biological molecules with metal nanoparticles of Ag and Au was studied in depth during the last year. This study was also directed in part to carry out the functionalization of NPs with biomolecules to confer greater biocompatibility and selectivity to the analytical applications of these systems. In order to fulfill this goal, it was conducted a study of interaction of therapeutical peptides such as somatostatine, octhreotide, lanreotide and pasereotide with Ag and Au nanoparticles. This work was done to monitor the structural changes occurring in these peptides once adsorbed onto the surface.

During the last year, progress was done in the research line dealing with the structural analysis of biological materials difficult to characterize by conventional spectroscopic techniques due to their large luminescence. This was the case of the standard humic substances (soil, leonardite and lignite) adsorbed on NP of diferent morphology. Specifically, we have conducted a SERS / SEF study of humic substances of different origin on NPs of different morphology, and prepared by means of different protocols developing strategies to increase the intensification of the fluorescence and Raman on metal surfaces. In this regard, it was carried out the functionalization of the surfaces with aliphatic diamines to increase the signal from the above polyphenolic molecules. This study was extended to commercial humic substances named "standard", which are the ones usually employed in all laboratories. The above functionalization process leads to a substantial increase of the SERS signal, due to the fact that these important natural compounds are negatively charged. These studies were performed in collaboration with researchers from the Universities of Bologna (Italy).

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

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

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

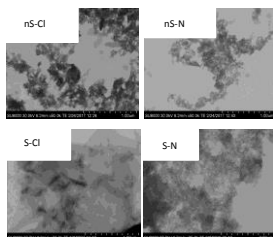
The application of SERS on the study of the Cultural Heritage was centered on the detection of dyes of difficult study by the normal Raman technique. Another important research line was the in-situ fabrication of silver NPs on natural fibers of wool by laser irradiation. This work was carried out in collaboration with the University of Bologna, during the stays of a master student in our department. The employ of this type of metallic substrates is very important for the analysis of artistic pigments and dyes. This is due to the ability to be prepared directly on a specific spot of the material (fibres, in this case) without leaving any mark on it. Irradiation at 442 nm gives rise to more versatile nanoparticles than irradiating at 532 nm. In the first case, SERS spectra can be obtained at various wavelengths (442, 532 and 785 nm). In the second case, SERS analysis can only be carried out at 532 nm. The optimization of the experimental conditions, such as laser power, irradiation time and silver nitrate concentration was carried out. The prepared nanoparticles were used for the analysis of synthetic dyes on mock and real samples of dyed wool samples.

Silver nanoparticles were prepared to be used as SERS spectroscopy supports free of stabilizing agents, as their presence in the media give rise to interfering bands that make difficult the detection and/or analysis of the studied compounds. Thus, two different procedures were carried out: the first one, the UV photoreduction of a silver salt in a hydroxipropyl cellulose (HPC) polymeric media, and the second one, the laser ablation of metallic silver un an aqueous media. In both cases, intense SERS spectra of artistic organic dyes could be obtained. HPC-based photoreduced silver colloids from silver nitrate solutions and polymer HPC were prepared. The substrate was exposed to different incident irradiations to initiate and accelerate the reduction to silver nanoparticles. Nanoparticles were characterized using different microscopic and spectroscopic methods. UV-Vis absorption spectroscopy was used for the determination of the surface plasmon resonance band and size distribution of the nanoparticles, while electron microscopy measurements gave information on the size, shape and distribution of the particles. The substrate's characteristics were compared to ones of the in-situ photoreduced substrate prepared by laser irradiation. Different reference compounds were used for testing and different paint layers (e.g. different dyes in different organic binders, in combinations, unaged and aged) prepared according to art technology were studied by Raman spectroscopy (using several excitation lines) and Surface Enhanced Raman Spectroscopy. A part of those layers was exposed also to artificial aging to mimic the real state of the paint layers on the works of art and to follow possible degradation processes. This work was carried out in collaboration with the Faculty of Chemistry and Chemical Technology of the University of Ljubljana, Slovenia.

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

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

A work of synthesis of C-S-H gels which is now in progress was started in 2015. These gels are the main component of the artificial construction materials. This work was conducted in order to evaluate the possible structural modifications induced by the variation of the initial Ca/Si ratio. Due to the amorphous nature of the compound, the structural evolutions of the material were studied by means of the Raman and ^{29}Si RMN spectroscopy, while the microstructure of the gels was studied by TEM.



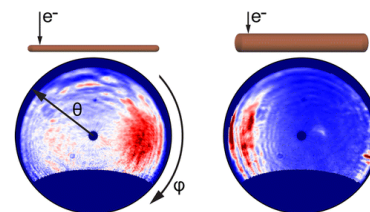
TEM image of calcium silicate hydrate synthesis, upper figure with nSA and lower figures with sodium silicate

In collaboration with the IETCC, during the 2016 year we have worked on the development of consolidant treatments related to the use of alcoholic emulsions of $\text{Ca}(\text{OH})_2$ nanoparticles as active principle. The goal of this research line is to increase the solubility of the calcium in order to decrease the amount of added product. We are working, with the calcium hydroxide nanoparticles synthesis.

Finally, in collaboration with the Servicio de Criminalística del Instituto Nacional de Toxicología y Ciencias Forenses de Madrid, a research line was started during the 2016 dealing with the study of a methodology of analysis of bones based on the application of the Raman technique.

SEMICONDUCTOR NANOWIRE PHOTOLUMINESCENCE & CATHODOLUMINESCENCE

Semiconductor nanowires (NWs) are promising candidates for lighting devices due to their efficient light outcoupling and synthesis flexibility. The emission from NWs can couple to waveguide modes supported by the NW geometry, thus governing the far-field angular pattern. We have investigated such geometry-induced coupling through a simple analytical model developed in our group. To demonstrate our predictions experimentally, we have used Fourier microscopy of the photoluminescence and cathodoluminescence of NWs with various diameters of the order of hundreds of nanometers. From the investigated diameter range, we conclude that a few nanometers difference in diameter can abruptly change the coupling of the emission to a specific mode, and in turn the angular pattern in the far-field emission. Among the observed phenomenology for specific NW dimensions, it is worth mentioning: narrow vertical beaming and directional polarized end facet emission (see figure). Our results are important for the design of quantum emitters, solid state lighting, and photovoltaic devices based on nanowires.



This has been done in collaboration with the groups of Prof. Jaime Gómez Rivas at FOM-Institute DIFFER (Eindhoven) & Prof. Albert Polman at FOM-Institute AMOLF (Amsterdam).

METAMATERIALS BASED ON HRI DIELECTRIC STRUCTURES

We have further investigated our recent theoretical proposal of the existence of the so-called localized magnetic plasmon resonances in $\mu < 0$ effective media made of all-dielectric (HRI) meta-atoms. In particular, we have theoretically explored a realistic $\mu < 0$ plasmonics with the wealth of applications of “electric” plasmonics expected reciprocally in its “magnetic” counterpart, for a wide spectral regime throughout the microwave, THz, far and near IR regimes. Part of this ongoing work has been carried out in collaboration with Prof. J.J. Sáenz (Donostia International Physics Center).

PLASMON SPECTROSCOPY: THEORETICAL AND NUMERICAL CALCULATIONS, AND OPTIMIZATION TECHNIQUES

We have continued our longstanding work on plasmonics, concerning theoretical and numerical tools required for the determination of the spectral properties of complex-shape nanoparticles exhibiting strong localized surface plasmon resonances (LSPRs). In particular, we have focused on the design of complex geometries to retrieve ad-hoc LSPR spectra, with special interest in single-nanoparticle surface-enhanced Raman scattering (SERS) and optical heating. Part of this ongoing work has been carried out in collaboration with Prof. E.R. Méndez (CICESE, Ensenada, México).

2B.3 MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Molecular physics of astrophysical and atmospheric systems.
- Study of cold plasmas by radioastronomical techniques.
- Dynamics and kinetics of chemical reactions.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Crystalization in cryogenic micro-jets of molecular liquids.
- Spectroscopic parameters of molecules of interest in atmospheric or combustion processes.
- High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.
- Molecular Quantum Control.
- Molecular Alignment and Orientation.
- Ultracold Quantum gases.
- Spectroscopic analysis of phyllosilicates.
- Theoretical characterization of secondary uranium oxide phases produced in conditions of storage of nuclear fuel

EMPLOYED TECHNIQUES:

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

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR PHYSICS OF ATMOSPHERES AND PLASMAS

This line of research is divided in the following sub-lines:

Molecular physics of astrophysical and atmospheric systems

One of our sub-lines is devoted to the investigation of ices similar to those present in different astrophysical environments, like the surface of interstellar dust grains, the surface of cold transneptunian objects, or in comets nuclei. Those ices contain mainly H₂O, CO₂, CH₄, CO, NH₃, N₂, and other minority neutral or ionic species. In particular, during 2016 we have concentrated in the study of CH₄ mixed with light hydrocarbons like C₂H₆ and C₂H₄, aiming to simulate some regions on the surface of the transneptunian objects Plutón y Caronte, to help to interpret the high quality data provided by the NASA New Horizon mission in 2015. At the IEM ice laboratory we recorded NIR and MIR spectra of pure species and binary mixtures of CH₄, C₂H₆, and C₂H₄ at 18 K and 30K, monitoring changes in peak position and band intensities in the mixture spectra with respect to the pure species spectra. Additionally, in

collaboration with M. A. Satorre from the Universidad Politécnica de Alcoy, with whom we have a Coordinated Project funded by MINECO, we have been able to determine absolute band intensities and infrared optical constants of these materials. The Alcoy group measures the density of ices grown at the same deposition conditions than those grown at IEM. Moreover, the visible refractive index, n_0 , of these materials is also obtained at the Alcoy laboratory. The density is necessary to estimate the infrared band strengths and the n_0 to obtain the IR optical constants of the ices. During 2016 we have set up a revised, improved version of our program that allows determining optical indices from IR spectra. This is a very interesting tool for astronomical research. Our results have been published in two papers, one in 2016 and the other in January 2017.

We have also investigated the diffusion of CH₄ in amorphous water ice at temperatures between 40 K and 60 K. This research is of great interest since it is well established that on the ice surface of interstellar dust grains a rich chemistry takes place, leading to molecular complexity and, eventually, to the formation of prebiotic molecules. The reaction velocity of the initial simple molecules, CH₄, CO, NH₃, etc., in a water dominated ice, depends on their meeting probabilities, i.e. on their diffusion coefficients. This work is under progress and the first results have been presented in several conferences.

A further line of work has been opened to collaborate with the Institute of Low Temperature Science (ILTS) of the University of Hokkaido at Sapporo, in particular with the group of Profs. Naoki Watanabe and Akira Kouchi, funded by an i-link CSIC project. They have first class experimental equipment which has been used to study CO/H₂O ice mixtures at various conditions. Our part of the collaboration deals initially with the prediction of the IR spectra of these mixtures, and the comparison with the observations. This work is under progress, with the first publication already in 2016.

We keep our collaboration with Dr. Guillermo Muñoz Caro and his group at Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA. The research on the prediction of spectra in the far-IR region of amorphous ice mixtures, in particular on water/methanol, and water/ammonia, of various proportions, including experimental measurements, has been already published.

From the experimental point of view during 2016 we have undertaken the design of a new ultra high vacuum chamber (with a base pressure in the range of 10^{-11} mbar). The chamber is already in our lab. We are in the process of setting it up. This chamber will open a new field of possibilities, allowing us to perform experiments that require very high purity or large time scales.

Regarding atmospheric studies, we have continued the collaboration with Dra Maria Teresa Baeza Romero, from Universidad de Castilla La Mancha. We obtained funding from the Ministerio de Economía y Competitividad to study the formation and reactivity of aerosols containing iodinated compounds by experimental and theoretical techniques. We have finished the first studies both theoretically and experimentally. After Dr. Oscar Galvez's depart from our group to the UNED, this line has been temporarily closed, although we hope to resume it in the near future.

We have continued on our spectroscopic research on the atmospheric aerosol described as mineral powder, which is basically composed of phyllosilicates such as smectites and montmorillonites, together with particles ranging from 2 to 50 μm of quartz, feldspat, calcite, iron and aluminum oxides, silicon, gypsum and aragonite, in collaboration with Dr. Ana María Fernández (CIEMAT). A similar study, from the technical point of view, has been started on minerals similar to the so-called regoliths, found on meteorites and other solar system objects. In this project we work in collaboration with the groups of Miguel Angel Satorre (UPV, Alcoy) and Olga Muñoz (IAA-CSIC, Granada), with whom we participate in an "Excellence Network" of the MINECO coordinated by the group of Guillermo Muñoz Caro at CAB (INTA-CSIC).

Within the frame of a Unidad Asociada with the Department of Physical Chemistry of the Complutense University, we have been collaborating with Dr. Pedro C. Gómez Calzada on the theoretical calculation of different molecular systems for several years. In recent times, we are working on a new field, consisting in the prediction of spectra in the near-IR region of amorphous ices by means of Molecular Dynamics. In particular, our aim is to predict the spectra of solids made of H₂O and various small molecules, like CO₂, CH₄ and others, such as are found to exist in the so-called Trans Neptunian Objects, including Plutón and Caronte, for which new data are becoming available from the New Horizons mission.

We have produced analogs of carbonaceous interstellar dust using cold plasmas generated in inductive RF discharges of He/CH₄ mixtures. The hydrogenated amorphous carbon (HAC) deposits formed have been characterized mainly by IR spectroscopy and have been bombarded with 5 keV electrons to simulate the effect of cosmic ray radiation. Previous literature work on the subject showed discrepancies between two experiments based on ion bombardment. In our laboratory we have studied the decay of the 3.4 μm band as a function of electron fluence to the sample. This band corresponds to stretching CH_x vibrations and it is the most characteristic feature of hydrocarbon dust in the diffuse interstellar medium, but it is not observed in the interior of dense clouds. Estimates based on our data indicate that the

effect of cosmic rays on HAC is very small and they are not expected to significantly destroy the carriers of the 3.4 μm band over the lifetime ($\approx 10^7$ yr) of a typical dense cloud. This result invites further investigation on other destruction mechanisms for the carriers of this band.

We are presently investigating these systems from a theoretical point of view, mainly using the CASTEP program, which allows predicting IR spectra for different structure as function of different variables, like for instance, density, which is crucial and not always accurately measured in astronomical samples. Calculations performed to date suggest that hydrocarbon interstellar dust could have a structure made of small aromatic islands linked by aliphatic chains. Several articles have already been published in this field.

We have finished the set-up and commissioning of the capacitive RF discharge reactor dedicated to the production of hydrocarbon dust nanoparticles. This reactor is not only intended for the generation of interstellar dust analogs, but also for the study of likely gas-phase mechanisms of dust formation that might be relevant in astronomical environments. The commissioning of the reactor included the testing of the various diagnostics techniques (mass spectrometry of neutrals and ions, optical emission spectroscopy and Langmuir probes).

Spectroscopy of cold plasmas by radioastronomic techniques

Within the European Synergy Grant - Nanocosmos and in collaboration with Prof. José Cernicharo, astrophysicist of ICMM - CSIC and his group, and the Observatorio Astronómico of Yebes (Guadalajara), we have developed, installed and demonstrated successfully the viability of the use of very sensitive and precise radioastronomic techniques to study rotational spectral lines emitted by stable species of astrophysical interest, such as OCS, in a low pressure gas cell, and radicals as CS or new species as CS₂ produced by cold plasmas in RF discharges. Space radiation collected by the antenna of the observatory is used as low radiation background (50 K). The detection of the dissociation products generated by an UV lamp on the cell precursors has given also satisfactory results. The results are presently being analyzed to be published.

The main results of this research subline can be seen in the papers and presentations to conferences listed in this Report.



Discharge chamber, detector of millimetric radiation and focusing set-up in the Observatorio Astronómico of Yebes to study the rotational emissions of radicals and molecules generated in cold plasmas.

Dynamics and kinetics of chemical reactions

We have finished the study of quantum dynamics for the $\text{D} + \text{MuH}(v=1)$ reaction started the previous year and carried out with the activities with the Unidad Asociada CSIC-UCM, Madrid (with F. J. Aoiz and V. Sáez-Rábanos) We have observed a pronounced maximum in the integral cross section for the $\text{DMu} + \text{H}$ channel which is caused by the deep attractive well in the adiabatic potential. Strictly speaking it cannot be termed “vibrational bonding” although the well is due to the stabilizing effect of the oscillation of the light Mu atom between the heavier H and D atoms. Unfortunately there are no experimental measurements for his system and they do not look feasible at present.

We have also started a theoretical study of dynamical resonances associated to vibrational excitation for the $\text{F} + \text{HD}(v)$ reaction. For this system, prototypic in the field of reaction dynamics and relevant in interstellar space, there are literature results, which show some resonance effects in the differential cross sections for $v=0, 1$. We intend to investigate in detail the characteristics of these resonances and to extend the study to higher vibrational levels ($v=2,3$), which are now experimentally available and where we expect a much more pronounced influence of dynamical resonances.

Molecular Quantum Control. Molecular alignment and orientation. Ultracold Quantum gases

We have continued the study of transport control in a quantum gas of interacting atoms or molecules. The proposed method requires an external time-dependent periodic potential -spatially asymmetric but symmetric in time-, along with a modulation of the interaction parameter in a pulsed way. Without interaction, the external potential induces an oscillating current whose average value must be asymptotically zero due to symmetry constraints. However, our previous work shows that the parameters can be chosen in such a way that the induced current shows a very simple oscillating behavior with large amplitude and controllable period, which can be chosen to match the relevant time scales of a given problem. In the presence of interaction, this regular oscillation can only be maintained within a limited range of the interaction to external potential ratio. Outside this range a strong interaction destroys the regularity of oscillations and the external potential is not able to modify the current. Thus, the control of the interaction parameter can start or stop a current change in the system in a very precise way, allowing for the generation of an asymptotic current whose direction and magnitude can be changed with successive pulses. This year we have studied the conditions that enhance the current and optimize its control. Due to the strong nonlinear character of the problem the current can exhibit a host of possible behaviors, ranging from rather regular and stable to aperiodic and extremely irregular oscillations.

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

The Laboratory of Molecular Fluid Dynamics is furnished with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy, developed over the last twenty four years, whose performance and flexibility are unique worldwide. Supersonic gas jets are a very fruitful research media, where the study of inelastic collisions, the fundamental mechanism of energy transfer between gas molecules, can be afforded. We have continued along 2016 studying these flows at the interface between the microscopic description, essentially molecular and quantum, and the macroscopic one, governed by the continuum fluid mechanics. Although both limits are well developed as independent fields, their link is a sort of no-man's land lacking experimental data, sufficiently rigorous theoretical models, and efficient calculation methods.

We have implemented several improvements to our two laboratory instruments. Instrument A (Jarrell-Ash spectrometer) has been adapted to be able to expand diluted mixtures of water vapor. For that purpose, it was necessary to install a mixer-evaporator system operating at 100 C with controlled flow rates, along with a temperature stabilized heating system for the gas pipe and the nozzle. In instrument B (Jobin-Yvon spectrometer) a new mass flow controller, by Coriolis effect, has been installed, able to control H₂O flow rates lower than 1 g/hour. This has allowed to expand highly diluted (<1%) gaseous mixtures of H₂O(g) in He or H₂, aimed at studying and quantifying the effect of the inelastic collisions of these gases on the H₂O molecules, minimizing the effect of H₂O:H₂O autocollisions.

We have carried out on instrument A numerous experiments to try to detect the formation of small clusters (dimers, trimers, etc.) of H₂O (g), i. e., the beginning of molecular condensation. To that goal, mixtures of 3% and 5% H₂O(g) in He have been expanded from a slit nozzle of 0.03x2 mm² at pressures between 0.150 and 1.0 bar: i) by axial scanning at increasing distances from the nozzle, and ii) by pressure scanning at a fixed distance of 1 nozzle diameter. In all these points, we have recorded the Raman spectrum of H₂O in the O-H stretching region (3600 cm⁻¹), but we have not observed so far the new spectral features that would indicate the presence of the small molecular clusters.

On the other hand, in instrument B we have carried out the first measurements on mixtures of HD (1%) in *para*-H₂ gas jets, at a pressure of 220 mbar from a circular nozzle of 325 μm. These experiments are aimed at determining the state-to-state rate coefficient for inelastic collisions of HD with *para*-H₂, of great astrophysical interest, but of which neither experimental nor calculated data are known.

Regarding the methodological development, some aspects of the fluid dynamics theory of supersonic jets, necessary for the experimental study of inelastic molecular collisions at temperatures above 120 K, have been improved along 2016. In particular, we have written or improved some new FORTRAN codes (MEQHH.FOR, TnH2T.FOR, TpH2T.FOR, etc.). Raw data (densities and rotational populations) from a large set of experiments carried out during 2014-2015 have been reduced as well to fluid dynamic data (translational and rotational temperatures, flow velocity, entropy). This set covers four series of *para*-H₂ and *nat*-H₂ expansions, and three series of expansions of H₂O highly diluted (~1%) in *para*-H₂ and *nat*-H₂. By combining such data in the Navier-Stokes and the reduced-Boltzmann equations (kinetic master equation), the state-to-state collision rates have been determined for the dominant inelastic processes in H₂:H₂ collisions in the 20 to 325 K thermal range, as well as preliminary results on H₂O:H₂ collision rates. In all of the above, original methodology from the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics, both experimental and theoretical, has been employed, due to the lack of suitable methods in the scientific literature.

Finally, we have recorded new vibrational and torsional Raman spectra of dimethyl-ether (DME), its doubly ¹³C substituted isotopologue, and of cooled DME in supersonic jet by employing a special cell to expand aggressive gases (flammable, solvents, etc.). The spectral region of the torsional overtones of DME is rather complex due to their coupling with the C-O-C bending mode, and the abundance of hot bands, but it is of astrophysical interest in order to

detect these molecules in the interstellar medium. The spectrum of cooled DME allowed us to unequivocally assign the torsional overtones and their first hot bands, amending a wrong assignment from the literature. This work is a collaboration with the department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (M. L. Senent) and with the University of Huelva (M. Carvajal). In the other regions of the vibrational Raman spectrum of DME, a significant simplification of the abundant hot band structure has been achieved as well, which paves the way to a safer analysis of its vibrational spectrum.

LASER SPECTROSCOPY

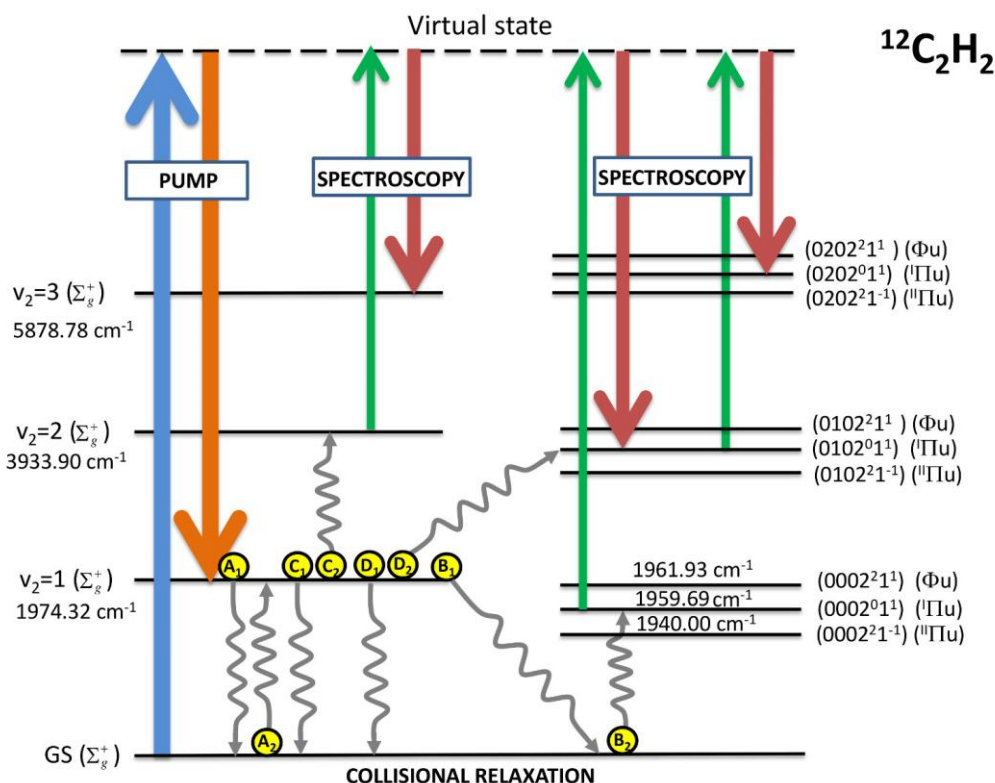
Spectroscopic parameters of molecules of relevance in atmospheric and combustion processes

In our ongoing collaboration with Dr. Ha Tran y Tuong Le Cong (Laboratoire de Météorologie Dynamique, UPMC, Paris) we have finished the classical molecular dynamics simulations of N₂-broadened methane lines. The comparison with the experimental results obtained with our difference-frequency spectrometer shows that the ab-initio calculated spectra reproduce with high fidelity non-Voigt effects in the measurements, and that classical molecular dynamic simulations can be used to predict spectral shapes of isolated lines of methane perturbed by nitrogen.

Raman spectroscopy of excited states populated by optical pumping and molecular collisions

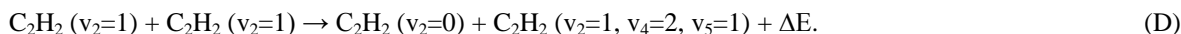
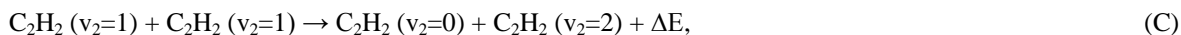
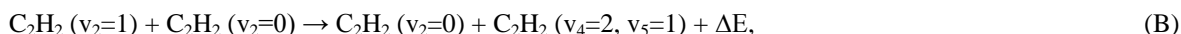
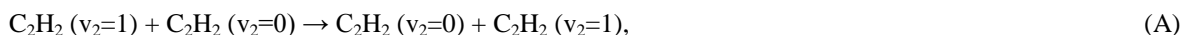
This line of research accounts almost exclusively for the work carried out in the stimulated Raman laboratory during 2016. Specifically, the study of excited vibrational states in isotopologues of acetylene started during the final months of 2015 has been completed and the results published in two articles in the *Journal of Raman Spectroscopy*.

A schematic representation of the “pump→collisional energy transfer→spectroscopy process” used in the study is presented in the attached figure, already particularized to ¹²C₂H₂. In the first stage (pump), two pulsed laser beams whose frequency difference is matched to the frequency of the Q branch of the ν_2 fundamental (C≡C stretching) of



acetylene are used to pump population, by stimulated Raman effect, to a single rotational level in $\nu_2=1$. These laser beams are represented in the figure by the two leftmost (blue and orange) arrows that connect the initial and final states of the transition through a “virtual state”. After this pump stage, a delay is introduced to allow V-V vibrational collisional relaxation to siphon population off $\nu_2=1$ and towards other vibrational states. The most relevant of these

collisional energy transfer processes are represented by the undulated arrows in the figure and labeled A, B, C and D (with the “1” and “2” subscripts representing each one of the two molecules involved in a collision). These corresponds to collisions of the types



Then the spectroscopy stage comes into play. This stage, also based on the use of a stimulated Raman setup, is used to obtain high resolution Raman spectra of transitions departing from the collisionally populated states. In this experiment, as represented by the arrows labeled “Spectroscopy” in the figure (green and red), we have probed transitions connecting these states to higher ones differing by a single quantum of v_2 , since these offer the largest Raman scattering cross-sections.

As a result, vibrationally excited states that had not been observed before in six different isotopologues of acetylene have now been located and assigned, and the known values of the energies of others previously observed states have been refined. The most relevant of the observed states are:

- $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$: $2v_2, 3v_2, 2v_4+v_5, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_2$: $2v_2, 3v_2, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{13}\text{C}_2\text{H}_2$: $2v_2, 3v_2, 2v_4+v_5, v_2+2v_4+v_5$.
- $^{12}\text{C}_2\text{D}_2$: $2v_2, 3v_2$.
- $^{13}\text{C}^{12}\text{CD}_2$: $2v_2, 3v_2$.
- $^{13}\text{C}_2\text{D}_2$: $2v_2, 3v_2$.

The observation of these states has allowed the obtention of new and improved rotational and vibrational parameters (like anharmonicity constants) for the lower part of the potential energy wells of these molecules, a difficult achievement in a family of molecules as extensively studied as the acetylenes.

High resolution spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.

We have continued the study of the HCl^+ ion in order to determine if there is a significant contribution to the spectrum of the magnetic interaction with the H nucleus. This has required an important experimental effort in order to allow the recording of spectra at temperatures close to the freezing point of HCl. Finally a new glass cell with vacuum insulation and a new hollow cathode have been designed and built. With the new design, the hyperfine structure of some of the multiplets corresponding to the lowest rotational states has been better resolved, allowing an increase in the number of transitions included in the global isotope-independent fit, which has been significantly improved. The predictions arising from the new fit has been incorporated to the “JPL spectral line catalogue”. Furthermore we have made calculations of opacities and column densities in space in the infrared, showing that this species could be observed in the diffuse medium with high resolution telescopes, hence providing an alternative for the study of this species in space.

Along the same line, we have started the study of the SiH^+ ion, which has not yet been observed in the laboratory in the mm-wave region, and is poorly characterized in the infrared, although it is of fundamental interest in the interstellar medium.

2B.4 MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

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.
- Nanoindentation.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Microrheology.
- Dynamic mechanical analysis under flexural and elongational deformation.
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and and tetradetection, and dynamic light scattering (DLS).
- Nanoimprint lithography (NIL).
- X Photon Correlation Spectroscopy (XPCS).
- Scanning transmission X-ray spectro-microscopy (STXM).
- Simulations using high performance computing (Supercomputing Centers and GPU).
- Near Edge X-ray Absorption Fine Structure (NEXAFS)
- Resonant Soft X-ray Scattering (RSOXS)

RESEARCH ACTIVITY:**Group of NANOSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF POLYMER SYSTEMS****DEVELOPMENT OF ADVANCED ELASTOMERIC CONDUCTIVE NANOCOMPOSITES BY SELECTIVE CHEMICAL AFFINITY OF MODIFIED GRAPHENE**

The incorporation of graphene in elastomeric matrices finds niche applications in the field of electromechanics. The critical issue for the optimization of the properties of graphene-filled materials is the appropriate dispersion of the filler and the optimum interaction with the matrix. In collaboration with the group of Prof. M. A. Gómez-Fatou (ICTP-CSIC), graphene was functionalized with short polyethylene brushes and a series of poly(styrene-*b*-ethylene-co-butylene-*b*-styrene) (SEBS) nanocomposites containing up to 2.5 vol. % of filler was prepared. It was found that the nanocomposites exhibit electrical conductivity above 0.7 vol. % graphene and retain the elastomeric character up to 1 vol. % of nanofiller. Small angle X-ray diffraction (SAXS) experiments carried out in the synchrotron radiation source ALBA, together with atomic force (AFM) and transmission electron microscopy (TEM) measurements reveal that graphene introduces significant distortion in the cylindrical packing morphology of SEBS, reducing the size of the domains and promoting isotropic distribution. SAXS, AFM and TEM results provided a sound understanding of the different conductivity mechanism that was found for low and high graphene contents.

LOCAL MECHANICAL PROPERTIES OF GRAPHENE/POLYETHYLENE-BASED NANOCOMPOSITES BY DEPTH-SENSING INDENTATION

Earlier work by the group of Prof. M. A. Gómez-Fatou showed that the effective incorporation of graphene in high density polyethylene (HDPE) can be achieved by attaching short polyethylene brushes to graphene. Three different routes were adopted to incorporate the ethylene brushes to the graphene sheets and significant differences in the macroscopic mechanical properties of the final materials were found. In this work, a study of the local mechanical properties of HDPE/graphene nanocomposites was carried out by means of nanoindentation. It was found that the three chemical approaches produced materials with different hardness, modulus and creep resistance at large penetration depths, and results were correlated to filler dispersion, matrix nanostructure and plasticization of the amorphous regions by the short-chain polyethylene. By reducing the indentation size, maps of the surface mechanical properties were generated, and, in one of the nanocomposites, an inhomogeneous filler distribution became apparent in agreement with its lower macroscopic performance. Nanoindentation measurements on graphene agglomerates revealed significantly lower values than those usually reported for graphene and this result was correlated with the limited macroscopic mechanical performance observed for all materials. Notwithstanding, one of the nanocomposites was found to achieve mechanical properties similar to that of the neat polymer, combined with outstanding electrical conductivity.

MAPPING THE MECHANICAL PROPERTIES OF POLY(3-HYDROXYBUTYRATE-CO-3-HYDROXYVALERATE) BANDED SPHERULITES BY NANOINDENTATION

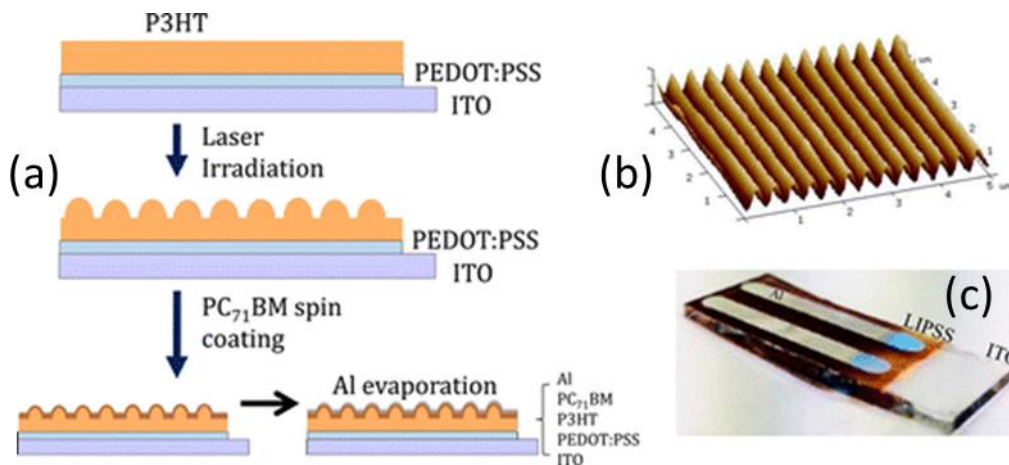
The mechanism of formation of polymer banded spherulites is a topic that has fascinated scientists for decades. The most accepted explanation is based on the regular twisting of the lamellar from the centre to the periphery. However, recent studies suggest that there is a discontinuity between neighbouring bands. In collaboration with the BIOPHYM group (IEM-CSIC), nanoindentation and AFM studies have been combined to provide new insight on the lamellar arrangement giving rise to polymer ringed spherulites. The spherulite banding of a poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) P(3HB-co-3HV) copolymer was fully characterized at specific locations, and the same area was subsequently explored by nanoindentation. Results reveal a continuous oscillation of mechanical maxima and minima across the spherulite banding that exactly matches the topographic valleys and crests observed by AFM. Results are in agreement with the model of regular lamellae twisting with flat-on lamellae in the valleys and edge-on lamellae in the crests.

Group of DYNAMICS AND STRUCTURE OF SOFT AND POLYMER MATTER (SOFTMATPOL)**NANOESTRUCTURATION OF SOFT CONDENSED MATTER WITH CONTROLLED MORPHOLOGIES**

Polymeric solar cells of periodic surface structures induced by laser (LIPSS)

We have continued exploiting the possibilities of using lasers in order to produce controlled nanostructuring of the surface of thin films of semiconductor polymers. In cooperation with the group of Dr. M. Castillejo and Dr. E. Rebollar (IQFR-CSIC) we have been successful, by using nanosecond laser with different wavelengths, in the nanofabrication of periodic surface structures (LIPSS) in thin thin films of semiconductor polymer blends and fullerenes with application in organic photovoltaic (OPV) solar cells. In particular we have found the conditions for the optimal formation of laser-induced periodic surface structures (LIPSS) on spin-coated films of poly (3-hexylthiophene) (P3HT). These conditions

can be transferred to the photovoltaic mixture formed by the 1: 1 mixture of P3HT and [6,6] -phenyl-C71-butyric acid (PC71BM) methyl ester when deposited on an indium tin oxide (ITO) coated with (poly (3,4-ethylenedioxythiophene): poly (styrenesulfonate) (PEDOT: PSS). Solar cells can be formed either using a LIPSS structured P3HT/PC71BM bilayer or a heterojunction with a LIPSS structured P3HT: PC71BM blend. These results suggest that LIPSS could be a technology compatible with organic photovoltaic devices.



(a) Scheme of the procedure followed for the manufacture of a P3HT/PCBM polymeric photovoltaic solar cell.
 (b) AFM image of a thin film of P3HT/PCBM nanostructured by LIPSS
 (c) Image rel of a polymeric photovoltaic cell.

Confinement effects on the crystalline features of poly(9,9-dioctylfluorene)

In collaboration with Dr. Jaime Martín de Imperial College, we have studied the effect of the two-dimensional spatial confinement on the internal structure of the semiconducting polymer poly(9,9-dioctylfluorene) (PFO). PFO melts were confined inside the cylindrical nanopores of anodic aluminium oxide (AAO) templates and crystallized via two crystallization strategies, namely, in the presence or in the absence of a surface bulk reservoir located at the template surface. We show that highly textured semiconducting nanowires with tuneable crystal orientation can be thus produced. The results presented here demonstrate the simple fabrication and crystal engineering of ordered arrays of PFO nanowires; a system with potential applications in devices where anisotropic optical properties are required, such as polarized electroluminescence, waveguiding, optical switching and lasing.

Application of synchrotron light for the study of the self-assembly of photosensitive block copolymers

Synchrotron light techniques have been used to investigate, in collaboration with the group of Luis Oriol and Mercedes Piñol of the University of Zaragoza, a new class of light-sensitive supramolecular amphiphilic block copolymers based on association through multiple H bonds between 4-isobutyloxyazobenzene moieties and 2,6-diacylaminopyridine moieties. A structural and thermal characterization of these supramolecular azo-copolymers has been carried out in solution. The work demonstrates the process of self-assembly of these supramolecular polymers in water and the study of their UV light response properties by UV-vis spectroscopy, dynamic light scattering (DLS), transmission electron microscopy (TEM) and Small Angle X-ray Dispersion (SAXS). The present functionalization strategy of non-covalent postpolymerization has provided water-stable self-assemblies with light response properties that can be used to charge and activate the delivery of small fluorescent molecules.

Modification of poly(dimethylsiloxane) as a basis for surface wrinkle formation: Chemical and mechanical characterization

In collaboration with Dr. Juan Rodríguez from the Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, the processes occurring during UV-ozone treatment on polydimethylsiloxane (PDMS) surfaces i.e. formation of a stiff silica-like layer and surface degradation have been studied. While the chemical changes have been evaluated using Confocal Raman Microscopy (CRM) with submicrometer resolution, partial surface degradation occurring during longer ozone treatments have been evidenced both by Optical Profilometry and AFM.

Whereas previous studies reported the formation of a thin silica layer of around 20–30 nm up to 200 nm depending on the method employed, herein, we demonstrated that in effect a thin rigid layer is formed but instead of a sharp interface predicted by previous reports a gradient depth profile was obtained. CRM evidenced the formation of a 4 μm layer of modified material. By Quantitative Nanomechanical Mapping (QNM) and based on the equations that predict the wrinkle formation, a surface layer thickness of around of 4.5 μm was also determined.

DYNAMICS UNDER CONFINEMENT IN SOFT CONDENSED MATTER AND POLYMER

Relaxation and Conductivity in P3HT/PC71BM Blends As Revealed by Dielectric Spectroscopy

The conduction mechanism and the molecular dynamics on the paradigmatic bulk heterojunction formed by poly(3-hexylthiophene) (P3HT) and phenyl-C71-butyric acid methyl ester (PC71BM) blends have been characterized by dielectric spectroscopy. The results show that hexyl lateral chains of the polymer exhibit a high frequency local motion, similar to a polyethylene-like relaxation. By dielectric spectroscopy the dependence with temperature of the conductivity has also been studied. The results in the low temperature region provide a method to estimate the energy offsets of the system due to the presence of the C71 derivative. In the high temperature region, the temperature dependence of the conductivity can be described by the Gaussian disorder model, and we have observed that the energetic disorder in this region does not depend upon the content of PC71BM in the blends.

DEVELOPMENT OF NEW POLYMER MATERIALS BASED ON: A) PTT AND COPOLYMERS OF PTT-PTMO WITH DIFFERENT NANOADDITIVES AND B) RENEAWABLE BIO-BASED RESOURCES

A comprehensive study was carried out on different polymer composites based on poly(trimethylene terephthalate) (PTT) and poly(trimethylene terephthalate-block-poly(tetramethylene oxide)) (PTT-PTMO) copolymers with nanoadditives such as single and multi-walled carbon nanotubes (SWCNT and MWCNT, respectively), expanded graphite (EG), graphene nanoplatelets (GNP), silicon carbide (SiC), polyhedral oligosilsesquioxane (POSS), and tungsten (IV) sulfide (WS₂). Samples at different concentrations were obtained and their thermal properties (DSC), structural characterization (WAXS) and electrical properties (BDS) have been studied. Likewise, by combining additives with different dimensionality, i.e. SWCNT (1D) and GNP (2D) we have obtained hybrid nanocomposites. A synergetic effect between both types of additives was shown. On the other hand, we have undertaken a new researching plan with the aim of obtaining new polymer materials based on renewable bio-based resources such as lactic acid and furfural.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS (BIOPHYM)

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS: SIMULATIONS AND EXPERIMENTS

A new insight into the conformation and melt dynamics of hydrogenated polybutadiene as revealed by computer simulations

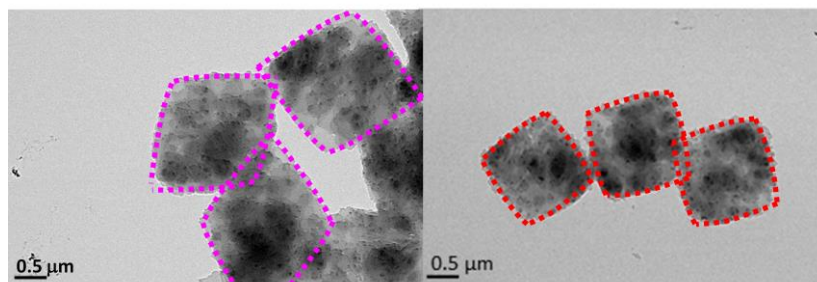
Extensive molecular dynamics simulations of the macromolecular conformation and the melt dynamics for model polymers of different molecular weights have been carried out. The selected models are hydrogenated polybutadienes with a 2% content of ethyl branches and linear polyethylene. It will be shown that the density and chain stiffness are clearly affected by both the molecular weight and the presence of ethyl branches. Furthermore, the results obtained from the simulations on the molecular size and, more remarkably, chain dynamics, perfectly match the neutron scattering experiments performed by Zamponi et al. in hydrogenated polybutadienes. We observe a clear chain contraction and a slow dynamics for the hydrogenated polybutadiene with respect to the linear chain of the same molecular length. Using the Likhtman–McLeish definitions, the obtained values of the entanglement relaxation time (τ_e) and the tube diameter (a) are found to be in agreement with the available experimental data (by rheology and neutron spin echo) as well as with those obtained by the simulations. Finally, a very good agreement of diffusion coefficients as a function of the molecular weight between simulations and experiments is observed. Therefore, there exists a clear difference between the results obtained for branched and linear polyethylene, accounting for a definitive effect of the short chain branching on the conformational properties and the melt dynamics of polyolefins

Coarse-grained simulations on the crystallization, melting and annealing processes of short chain branched polyolefins

We have performed coarse-grained (CG) molecular dynamics simulations studies on supercooled linear and SCB PE. This is the first time that a CG simulation study is carried out on the crystallization process of SCB PEs. Crystallization and subsequent melting temperatures are related linearly to the inverse of the lamellar thickness (Thomson-Gibbs relation). The changes observed in the crystallization and melting lines with the crystal size are consistent with experimental observations, including the existence of different melting lines depending on the short chain branching content, the emergence of a unique crystallization line and possible different mechanisms for the stabilization of the crystals. Additionally, a strong lamellar thickening process is reported for the linear model at temperatures below the melting point, which follows the classical interpretation, with a logarithmic increase of the crystal thickness with time. However, for the branched samples the thickening is impeded at the same degree of undercooling. In the branched models the SCBs are excluded from the crystal remaining at the surface and amorphous regions. This causes the pinning of these regions, minimizing crystal chain diffusion and hindering crystal stem thickening.

New habits in branched polyethylene single crystals

We have studied the morphology of single crystals of branched polyethylene, in collaboration with Prof. A. Müller (IKERBASQUE, Universidad del País Vasco). Faceted polymer single crystals obtained from solution have been examined for decades. It is well known that solution-grown linear polyethylene single crystals may exhibit different and often complex morphologies and habits. However, the effect of molecular architecture (i.e., SCB) remains practically unexplored. At the highest crystallization temperature investigated, the shape of the crystals is lozenge-like, but with curved and slightly truncated $\{1\ 1\ 0\}$ faces. As the crystallization temperature decreases, strong changes in the width-to-length ratio and, consequently in the characteristic angles of the single crystal occur. Interestingly, the single crystals obtained at the lowest crystallization temperature explored exhibit a nearly square shape. This phenomenon has not yet been observed in linear high molecular weight PE, for which the characteristic lozenge habit with straight $\{1\ 1\ 0\}$ faces is retained as crystallization temperature decreases. This result is probably linked to different steric conditions of chain attachments into non-equivalent niches induced by the presence of branches.



TEM micrographs of branched PE single crystals at two different crystallization temperatures, and their calculated shapes represented as dotted outlines after application of Shcherbina and Ungar's approach for asymmetric growth front.

SIMULATIONS AND EXPERIMENTS IN BIOMOLECULES AND BIOLOGICAL SYSTEMS

Conformational analysis of short polar side-chain amino-acids through umbrella sampling and dft calculations

Molecular and quantum mechanics calculations were carried out in a series of tripeptides (GXG, where X = D, N and C) as models of the unfolded states of proteins. The selected central amino acids, especially aspartic acid (D) and asparagine (N) are known to present significant average conformations in partially allowed areas of the Ramachandran plot, which have been suggested to be important in unfolded protein regions. In this report, we present the calculation of the propensity values through an umbrella sampling procedure in combination with the calculation of the NMR J-coupling constants obtained by a DFT model. The experimental NMR observations can be reasonably explained in terms of a conformational distribution where PP_{II} and β basins sum up propensities above 0.9. The conformational analysis of the side chain dihedral angle (χ_1), along with the computation of $^3J(H^{\alpha}H^{\beta})$, revealed a preference for the g^- and g^+ rotamers. These may be connected with the presence of intermolecular H-bonding and carbonyl-carbonyl interactions sampled in the PP_{II} and β basins. Taking into account all those results, it can be established that these residues show a similar behavior to other amino acids in short peptides regarding backbone φ , ψ dihedral angle distribution, in agreement with some experimental analysis of capped dipeptides.

Evidences of changes in surface electrostatic charge distribution during stabilization of HPV16 virus-like particles

In collaboration with Sino Biological Ltd. (China) we have examined the stabilization of human papillomavirus type 16 virus-like particles by means of different techniques including dynamic and static light scattering, transmission electron microscopy and electrophoretic mobility. All these techniques provide different and often complementary perspectives about the aggregation process and generation of stabilized virus-like particles after a period of time of 48 hours. Interestingly, static light scattering results point towards a clear colloidal instability in the initial systems, as suggested by a negative value of the second virial coefficient. This is likely related to small repulsive electrostatic interactions among the particles, and in agreement with relatively small absolute values of the electrophoretic mobility and, hence, of the net surface charges. At this initial stage the small repulsive interactions are not able to compensate binding interactions, which tend to aggregate the particles. As time proceeds, an increase of the size of the particles is accompanied by strong increases, in absolute values, of the electrophoretic mobility and net surface charge, suggesting enhanced repulsive electrostatic interactions and, consequently, a stabilized colloidal system. These results show that electrophoretic mobility is a useful methodology that can be applied to screen the stabilization factors for virus-like particles during vaccine development.

Structure and temporal dynamics of the bacterial communities associated to microhabitats of the coral *Oculina Patagonica*

Corals are known to contain a diverse microbiota that plays a paramount role in the physiology and health of holobiont. In collaboration with the University of Alicante and The National Museum of Natural Science (MNCN-CSIC) we have studied the bacterial community composition from the mucus, tissue and skeleton of the scleractinian coral *Oculina patagonica* at two locations in the Western Mediterranean Sea, to further understand how environmental conditions and the coral microbiome structure are related. We used denaturing gradient gel electrophoresis in combination with next-generation sequencing and electron microscopy to characterize the bacterial community. The bacterial communities were significantly different among coral compartments, and coral tissue displayed the greatest changes related to environmental conditions and coral health status. Species belonging to the *Rhodobacteraceae* and *Vibrionaceae* families form part of *O. patagonica* tissues core microbiome and may play significant roles in the nitrogen cycle. Furthermore, sequences related to the coral pathogens, *Vibrio mediterranei* and *Vibrio coralliilyticus*, were detected not only in bleached corals but also in healthy ones, even during cold months. This fact opens a new view onto unveiling the role of pathogens in the development of coral diseases in the future.

Biosignatures and microbial fossils in endolithic microbial communities colonizing Ca-sulfate crusts in the Atacama desert

Since the description of microbial communities colonizing Ca-sulfate crusts in the Atacama Desert, there has been much interest in the mechanisms that could lead to the formation and preservation of biosignatures or microbial fossils of these communities. A key to understanding physico-chemical processes of taphonomy and early diagenesis is to examine microfossils in their natural environment. In this study, we have characterized in collaboration with the MNCN-CSIC the organomineral traces and microbial fossils found around microbial communities present in these Ca-sulfate crusts. Through scanning electron microscopy, microanalytical (EDS) and Raman spectroscopy techniques, calcium carbonate precipitates were detected around remnants of cryptoendolithic algae beneath the crust surface. As what seems to be the final step in the organomineralization of these cryptoendolithic communities, we also observed alga cell remains permineralized by Mg-Si-rich minerals inside gypsum crystals. Additionally, Mg-Si bearing minerals formed a web-like structure within the hypoendolithic cyanobacterial habitat via permineralization of extracellular polymeric substances. Our observations indicate that despite the extremely hyperarid environment, microenvironmental conditions may be appropriate for the formation of biosignatures and microbial fossils of extinct endolithic microbial communities.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

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

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

Code or Reference: FIS2012-34479.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Jorge Dukelsky Bercovich.

Duration: January 2013-December 2015 (extended September 2016).

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

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

Code or Reference: FIS2015-63770-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Jorge Dukelsky and Rafael Alejandro Molina.

Duration: January 2016-December 2018.

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

Quantum information technologies in Madrid+ (QUITEMAD+).

Code or Reference: S2013/ICE-2801.

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid.

Main Researcher: Miguel Ángel Martín-Delgado (UCM) / *Participation:* J. Dukelsky, R.A. Molina.

Duration: January 2015-December 2016.

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

Gravitación y teoría de campos: cuantización, simetría y mecánica estadística.

Code or Reference: FIS2014-57387-C3-3-P.

Funding Institution: MINECO.

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

Duration: January 2015-December 2017.

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

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

Code or Reference: FIS2014-51.971-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido.

Duration: January 2015-December 2017.

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

Universal properties of few-body systems in Nuclear Physics.

Code or Reference: i-LINK1056.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Eduardo Garrido Bellido.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: Study of universal features of open quantum systems.

Cosmología Cuántica de Lazos y Agujeros Negros.

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

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Guillermo A. Mena Marugán and Gianluca Calcagni.

Duration: January 2015-December 2017.

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

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

Code or Reference: FPA2015-69037-REDC.

Funding Institution: MINECO.

Main Researchers: Luis Garrido Beltrán. *At IEM:* Guillermo A. Mena Marugán.

Duration: January 2016-December 2017.

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

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

Code or Reference: FIS2013-40626-P.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: January 2014-December 2016.

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

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

Code or Reference: FIS2016-76418-P.

Funding Institution: MINECO. **FEDER**

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: December 2016-December 2020.

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

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

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

Funding Institution: European Community (Seventh Framework Programme).

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

Duration: 2012-2016.

Anion CosChem Exploring the Chemistry and Spectroscopy of Cosmic Anions.

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

Funding Institution: Agence National de la Recherche ANR (France).

Main Researcher: Ludovic Biennier (Rennes, France) (participation of M.L. Senent).

Duration: 2014-2018.

Acción COST Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CM1401.

Funding Institution: COST, European Union.

Main Researcher: L. Wiesenfeld (Grenoble, France). Management committee (Spain): M.L. Senent, O. Roncero.

Duration: 2015-2018.

Acción COST Molecules in Motion, MOLIM.

Code or Reference: CM1405.

Funding Institution: COST, European Union.

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

Duration: 2015-2019.

Simulación cuántica de modelos en red con fibras ópticas.

Code or Reference: FIS2014-61633-EXP.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: September 2015-August 2017.

Objectives: Experimental simulation of quantum tight-binding models in optical fiber bunches.

Vibronic models for efficient energy transfer.

Code or Reference: i-LINK0938.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2015-December 2016.

Objectives: Theoretical study of excitonic dynamics in molecular crystals with vibrational modes with applications to photosynthesis and artificial light-harvesting devices.

Cosmology and Astrophysics Network for Theoretical Advances and Training Actions (CANTATA).

Code or Reference: CA15117.

Funding Institution: COST (European Cooperation in Science and Technology).

Main Researchers: Ruth Lazkoz. *At IEM:* Gianluca Calcagni (not IP).

Duration: April 2016-April 2020.

Objectives: To construct an effective theory of gravity capable of encompassing both the phenomenology related to the lack of a quantum field theory of gravity, and the phenomenology related to the various astrophysical scales (e.g self-gravitating systems, galaxies, large scale structure) that cannot be explained within the framework of general relativity without including dark matter and dark energy.

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

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

Code or Reference: FIS2014-52212-R

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2015-December 2017.

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

Surface-Enhanced optical analysis based on plasmonic effects of dyes in archaeological textiles of the Chilean Cultural Heritage.

Code or Reference: COOPB20146

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas – CSIC-.

Main Researcher: Santiago Sánchez Cortés.

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: Characterization of organic pigments in textiles of the Chilean Cultural Heritage by *in-situ* Surface-enhanced Raman scattering.

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

Code or Reference: FPA2012-32443.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2013-April 2016.

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.

Estudios Experimentales de la Estructura Nuclear Exótica.

Code or Reference: FPA2015-64969-P.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: January 2016-December 2019.

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

European Nuclear Science and Application Research 2.

Code or Reference: 654002.

Funding Institution: Comisión Europea European Union.

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: March 2016-February 2020.

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

Materiales Carbonosos Nanoestructurados para Atrapado y Confinamiento Molecular.

Code or Reference: MAT2012-33633.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Carlos Cabrillo García.

Duration: January 2012-December 2016.

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

Desarrollo de un sistema Raman automatizado para el diagnóstico de tumores (ONCORAMAN).

Code or Reference: RTC-2014-1842-1

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Pedro Carmona Hernández.

Duration: January 2015-March 2016.

Objectives: Development of an automated Raman system for diagnosing tumors on the basis of spectral biomarkers.

Nuclear structure research in exotic nuclei: Experimental and theoretical studies and instrumental developments for AGATA.

Code of Reference: FPA2014-57196-C5-4-P

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad

Main researcher: Andrea Jungclaus

Duration: January 2015- December 2017

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

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2016-December 2018.

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

Nanoantenas Ópticas Plasmónicas y Semiconductoras (NANOPLAS+).

Code or Reference: FIS2012-31070.

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: January 2013-December 2016.

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

Red de Excelencia CONSOLIDER en METAMATERIALES (RedMETA).

Code or Reference: TEC2015-69195-REDC.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación. Programa Consolider-Ingenio.

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

Coordinator: Javier Martí Sendrá (NTC-UPV).

Duration: 2015-2016.

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.

Nanofuentes Fototérmicas Plasmónicas.

Code or Reference: 2015CD0011.

Funding Institution: i-COOP LIGHT 2015 (CSIC).

Main Researcher: José A. Sánchez Gil.

Duration: October 2015-December 2016.

Objectives: To investigate theoretically and experimentally metallic nanostructures as thermal sources at the nanoscale upon illumination at plasmon resonance conditions, developing the research skills of PhD students from the foreign institution (CICESE, Ensenada, México).

Desarrollo de sensores SERS mediante la encapsulación de nanopartículas metálicas para la detección ultrasensible de colorantes orgánicos

Code or Reference: PIE 01560I029

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Main Researcher: M^a Vega Cañamares Arribas

Duration: December 2015-December 2016.

Objectives: Fabrication of silver nanoparticles by laser ablation and encapsulation on an agar gel. Characterization of the suspended and encapsulated nanoparticles by UV-visible spectroscopy and TEM (transmission electron microscopy). Use of the agar-gel loaded with silver as SERS sensors in the detection of diamond green.

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

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

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

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

Duration: January 2016-December 2018.

Objectives: New materials development with sustainability proposal

Tecnologías y conservación de materiales del patrimonio. Geomateriales 2.

Code or Reference: S2013/MIT-2914

Funding Institution: Comunidad Autónoma de Madrid (CAM).

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

Duration: October 2014-October 2018.

Objectives: To understand geomaterial alteration processes and mechanisms, developing strategies for their protection and conservation by enhancing their resistance to decay and, consequently, their durability.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Estudio de sistemas de interés atmosférico y astrofísico mediante espectroscopía láser.

Code or Reference: FIS2012-38175

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researcher: Dionisio Bermejo Plaza.

Duration: January 2013-December 2016.

Objectives: To employ the high resolution and high sensitivity laser spectroscopy techniques that we have set up in our laboratories to study gas-phase molecular systems that are relevant in atmospheric, planetologic or astrophysical studies. The goal of this research is to obtain spectroscopic parameters that are of use in the interpretation of current observing missions, and to verify formalisms that foster the knowledge of molecular collisions physics.

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

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

Funding Institution: EUROPEAN RESEARCH COUNCIL - SYNERGY GRANTS.

Main Researcher: José Cernicharo Quintanilla

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

Duration: August 2014-July 2020.

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

Modelos experimentales y teóricos para sistemas astrofísicos y atmosféricos.

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

Funding Institution: Ministerio de Economía y Competitividad.

Main Researchers: Víctor J. Herrero and Isabel Tanarro.

Duration: January 2014-December 2017.

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

Hielo, gas y polvo en astrofísica de laboratorio.

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

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

Main Researchers: María Belén Maté and Isabel Tanarro.

Duration: December 2016-December 2020.

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

Astrophysical ices in the lab.

Code or Reference: i-link 1027

Funding Institution: CSIC

Main Researchers: Rafael Escribano and Naoki Watanabe

Duration: January 2016-December 2017.

Objectives: To establish a solid link with the ILTS group at Sapporo (Japan), which will enable us to acquire the necessary skills to improve our lab, and to provide ILTS researchers with the theoretical background and experience to incorporate to the theoretical part of their investigations.

Polvo cósmico.

Code or Reference: AYA2015-71975-REDT

Funding Institution: MINECO

Main Researchers: Guillermo Muñoz, Rafael Escribano, Miguel Ángel Satorre and Olga Muñoz

Duration: December 2015-November 2017.

Objectives: To create a network of 4 Spanish laboratories working on cosmic dust from different points of view and using different and complementary technology. To that aim, several meetings and workshops will be organized.

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

Coordinator: José Cernicharo

Duration: January 2010-December 2016.

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.

The rotational torsional spectrum of mono-deuterated dimethyl ether (DME) with backbones $^{12}\text{C-O-}^{12}\text{C}$, $^{12}\text{CO-}^{13}\text{C}$ and $^{13}\text{C-O-}^{13}\text{C}$.

Code or Reference: 20150351.

Funding Institution: SOLEIL Synchrotron.

Main Researcher: Pia Kutzer.

(IEM participants: José María Fernández).

Duration: September 2015-February 2016.

Objectives: High resolution spectrum of mono-deuterated species of DME in the spectral range from 100 cm^{-1} to 700 cm^{-1} , to identify the lowest excited torsional modes and their coupling with the bending mode.

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: May 2011-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.

Our Astro-Chemical History.

Code or Reference: CMST COST Action CM1401

Funding Institution: European Cooperation in Science and Technology

Main Researchers: Laurent Wiesenfeld

Spanish delegates: Octavio Roncero and M^a Luisa Senent

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

Duration: November 2014-November 2018.

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

Code or Reference: FIS2013-48275-C2.

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Guzmán Tejeda and Salvador Montero.

Duration: January 2014-December 2016.

Objectives: State-to-state rate coefficients for inelastic collisions of H_2O with He and H_2 , and of O_2 with He at low temperature, homogeneous clustering of H_2O and O_2 .

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

Code or Reference: PIRSES-GA-2012

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

Main Researchers: David. Benoit, María Luisa Senent, Majdi Hochlaf and Najia Komiha.
(IEM Participants: Vicente Timón).

Duration: October 2012-October 2016.

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

EAGER: Polarimetric-Raman Lidar for Tropospheric Ice and Liquid water fraction.

Code or Reference: 1443222

Main Researchers: G.J. Fochesatto.

(IEM Participants: Óscar Gálvez and Rafael Escibano).

Funding Institution: NSF-US National Science Foundation. AGS - GEO/ATM Atmospheric Chemistry Division.

Duration: May 2014-April 2016.

Objectives: Demonstrate the feasibility of Raman spectroscopy combined with polarimetric Lidar to identify the fraction of ice, liquid and water vapor on tropospheric aerosols and cloud layers.

3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

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

Code or Reference: MAT2012-33517.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro.

Duration: January 2013-July 2016.

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

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

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

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro.

Duration: January 2016-December 2018.

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

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

Code or Reference: PIE201360E097

Funding Institution: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar.

Duration: March 2014-March 2017.

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

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

Code or Reference: MAT2014-59187-R

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: Aurora Nogales and Mari Cruz García.

Duration: January 2015-December 2017.

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

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

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

Funding Institution: MINECO

Main Researcher: Araceli Flores Aguilar-Amat.

Duration: January 2014-December 2017.

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

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

Code or Reference: RYC-2011-09585.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: January 2012-December 2016.

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

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH INDUSTRIAL COMPANIES

Developing Monte Carlo code to simulate polyolefins and their copolymers.

Code or Reference: 010103150002

Company: MITSUI CHEMICALS, INC. (Japan)

Main Researcher: Javier Ramos Díaz.

Duration: February 2015-April 2016.

Objectives: Implementation of MC moves to study polyolefins of different molecular architecture.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES / CONGRESSES AND MEETINGS

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

10th International young researcher workshop on GMC (HIP-Paris) (*Intertional UE congress*), Paris (France), 13th-15th of January 2016.

- *Hamiltonian dynamics of the parametrized electromagnetic field* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

4th EFI Winter Conference on Quantum Gravity (*International non-UE congress*), Tux (Austria), 15th-19th of February 2016.

- *Unique Quantization of a Dirac Field with Unitary Dynamics* (Oral contribution), B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, and G. A. Mena Marugán.
- *Quantum Corrections to the Mukhanov-Sasaki Equations* (Oral contribution), Laura Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

Astrophysical Ices in the Lab, AILAB (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 7th-8th of March 2016.

- *Weak intramolecular interaction effects on the structure and low temperature spectra of ethylene glycol, an astrophysical species* (Invited talk), R. Boussessi and M.L. Senent.

WG1 & 4 meeting of the Cost Action CM1401 (*International UE congress*), Pisa (Italy), 8th-9th of March 2016.

- *The torsional spectrum of dimethyl-ether. New experiments and assignments* (Oral contribution), J.M. Fernández, G. Tejada, M. Carvajal and M.L. Senent.

Non-equilibrium condensed matter and biological systems (*International UE congress*), Madrid (Spain), 9th-11th of March 2016.

- *Superradiance at the localization-delocalization crossover in chlorosomes* (Invited talk), R.A. Molina.

Workshop on Future directions for nuclear structure and reaction theories: Ab initio approaches for 2020 (*Intertional non UE congress*), Caen (France), 14th-18th of March 2016.

- *Polynomial Similarity Transformation Theory: From coupled cluster doubles to number projected BCS* (Invited talk), J. Dukelsky.

APS March Meeting 2016 (*International non-UE congress*), Baltimore (USA), 14th-18th of March 2016.

- *Flat band of midgap rotating surface states in 3D Dirac and Weyl semimetals under circularly polarized radiation* (Oral contribution), José González.

ANION COS CHEM annual meeting (*International UE congress*), Rennes (France), 15th-16th of March 2016.

- *Spectroscopie électronique des anions* (Invited talk), R. Boussessi and M.L. Senent.

IberCos 2016: XI Iberian Cosmology Meeting (*International UE congress*), Vila do Conde (Portugal), 29th-31st of March 2016.

- *Status of multi-scale theory* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

Shapes of Gravity (*International non-UE congress*), Nijmegen (The Netherlands), 30th of March- 1st of April 2016.

- *Primordial Fluctuations in Quantum Cosmology* (Plenary talk), G.A. Mena Marugán, L. Castelló Gomar, and Mercedes Martín-Benito.
- *Quickly Bounding towards a Dark and Compact End* (Invited talk), Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio, L.J. Garay, and Gil Jannes.

8th Jerte Advanced Relativity Meeting (*Local congress*), Navaconcejo (Cáceres), 23rd-26th of May 2016.

- *Man on the Moon: The Case for Unitary Dynamics* (Invited talk), Jerónimo Cortez, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
- *Quickly Bounding towards a Dark and Compact End* (Invited talk), Carlos Barceló, Raúl Carballo-Rubio, L.J. Garay, and Gil Jannes.
- *Status of Multi-Scale Theories: From QED to Gravitational Waves* (Invited talk), Gianluca Calcagni.
- *Quantum Corrections to the Mukhanov-Sasaki Equations* (Oral contribution), L. Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.
- *The Dirac Fermion in Cosmology: Uniqueness Criteria* (Oral contribution), Jerónimo Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
- *Totally Gauge-Invariant Formulation of Perturbed FRW Cosmologies* (Oral contribution), L. Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

- *On Thermalization Timescales, KMS Detailed Balance, and AntiUnruh Phenomena* (Oral contribution), Luis J. Garay, E. Martín-Martínez, and J. de Ramón.

Carlofest (*International non-UE congress*), Marseille (France), 23rd-27th of May 2016.

- *Time, gauge and parametrized field theories* (Plenary Talk), J.F. Barbero González.

8th Workshop on Quantum Phase Transitions in Nuclei and Many-Body Systems, QPTN (*UE congress*), Prague (Czech Republic), 6th-9th of June 2016.

- *Signatures of nuclear shape transitions in ground-state properties of neutron-rich* (Invited talk), P. Sarriguren, R. Rodríguez-Guzman, L.M. Robledo.

International Symposium on Molecular Spectroscopy 71st Meeting (*International non-UE congress*), Champaign-Urbana, Illinois (USA), 20th-24th of June 2016.

- *Weak intramolecular interaction effects on the structure and low temperature spectra of ethylene glycol, an astrophysical species* (Oral contribution), R. Boussessi and M.L. Senent.

Utrecht Cosmology Symposium 2016 (*International UE congress*), Utrecht (The Netherlands), 27th of June-1st of July 2016.

- *Cosmological Perturbations in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), L. Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.

60 Years of Molecules, Motion and Matrix Elements (*International non-UE congress*), Gaithersburg, MD (USA), 27th-28th of June 2016.

- *The torsional spectrum of dimethyl-ether. New experiments and assignments* (Invited talk), M.L. Senent, M. Carvajal, J.M. Fernández and G. Tejada.

International workshop on disordered systems (IWDS10) (*International non-UE congress*), Brescia (Italy), 27th June-1st July 2016.

- *Zero-mode rotating surface states in 3D Dirac and Weyl semimetals* (Invited talk), R.A. Molina.
- *Localization-level repulsion relation in a 1D driven disordered quantum system* (Poster), E. Benito-Matías, R.A. Molina.

21st International Conference on General Relativity and Gravitation (GR21) (*International non-UE congress*), New York (USA), 10th-15th of July 2016.

- *Uniqueness of the Fock Quantization of Dirac Fields with Unitary Dynamics* (Oral contribution), B. Elizaga Navascués, J. Cortez, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
- *Primordial Fluctuations in Quantum Cosmology* (Oral contribution), Mercedes Martín-Benito, Laura Castelló Gomar, and Guillermo A. Mena Marugán.
- *Parametrized theories, making EM even “gaugier”* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

The 23rd European Conference on Few-Body Problems in Physics, EFB23 (*UE congress*), Aarhus (Denmark), 8th-12th of August 2016.

- *Three-body wave functions in the continuum. Application to the Coulomb case* (Oral contribution), E. Garrido.

Molecules in Motion WG1: Energy resolved methods (*International UE congress*), Helsinki (Finland), 22nd-24th of August 2016.

- *Weak intramolecular interaction effects on the torsional spectra of ethylene glycol, an astrophysical species* (Invited talk), M.L. Senent and R. Boussessi.

Zakopane Conference on Nuclear Physics: Extremes of the Nuclear Landscape (*UE congress*), Zakopane (Poland), 28th of August-4th of September 2016.

- *QRPA calculations of stellar weak-interaction rates* (Oral contribution), P. Sarriguren.

XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 29th of August-2nd of September 2016.

- *Multi-Scale Spacetimes, from Theory to Phenomenology: Standard Model, Gravitational Waves and CMB* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

Einsten on the beach 2016. II Jornadas en Corrientes científicas del mundo contemporáneo (*National congress*), Murcia (Spain), 7th-10th of September 2016.

- *The quantum harmonic oscillator (I) y (II)* (Invited talk), J.F. Barbero.

MOLEC 2016. European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (*International non-UE congress*), Toledo (Spain), 11th-16th of September 2016.

- *Theoretical Spectroscopic Characterization of Gaseous Ethylene Glycol Isotopologues at Low Temperatures* (Poster), R. Boussessi, M.L. Senent and N. Jaïdane.
- *Selectivity of Imidazole for CO₂ Capture in a Rich Atmosphere in Greenhouse Effect Gases CH₄ and SF₆* (Poster), R. Boussessi, S. Dalbouha, M.L. Senent, N. Komiha and N. Jaïdane.
- *Selectivity of Imidazole for CO₂ Capture in a Rich Atmosphere in the pollutants: CO₂, NH₃, SO₂ and CO and N₂O* (Poster), S. Dalbouha, R. Boussessi, N. Komiha, and M.L. Senent.
- *Theoretical Spectroscopic Characterization at low Temperatures of C₂H₃NO and its Isomers* (Poster), S. Dalbouha, M.L. Senent, N. Komiha, and R. Domínguez-Gómez.
- *Ab initio study on the photodissociation of CH₃O and CH₃S radicals: The effect of spin-orbit coupling* (Poster), A. Bouallagui, A. Zanchet, N. Jaïdane, O. Yazidi, M.L. Senent, L. Bañares and A. García Vela.
- *Theoretical study of the photodissociation of the ethyl radical from the 3s and 3p Rydberg states* (Poster), A. Bouallagui, A. Zanchet, N. Jaïdane, M.L. Senent, L. Bañares and A. García Vela.

NEB-17, Recent developments in gravity (*International non-UE congress*), Mykonos (Greece), 19th-23rd of September 2016.

- *Parametrized Fields: gauge symmetries and boundaries* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

Workshop on Proton-neutron pairing and alpha-like quartet correlations in nuclei, Trento (Italy), 19th-23rd of September 2016.

- *Exactly solvable proton-neutron models* (Invited talk), J. Dukelsky.

2nd MOLIM General Meeting (*International UE congress*), Dubrovnik (Croatia), 10th-12th of October 2016.

- *Selectivity of Imidazole for CO₂ Capture in a Rich Atmosphere in the pollutants: CO₂, NH₃, SO₂ and CO and N₂O* (Poster), S. Dalbouha, R. Boussessi, N. Komiha, N. Jaïdane, and M.L. Senent.
- *Theoretical Spectroscopic Characterization at low Temperatures of C₂H₃NO and its Isomers* (Poster), S. Dalbouha, M.L. Senent, N. Komiha, and R. Domínguez-Gómez.

Workshop on Non Linear Integrable Systems, Burgos (Spain), 20th-22nd of October 2016.

- *On the realization of limit cycles in planar polynomial systems* (Oral contribution), Juan Margalef Bentabol.

First CANTATA Meeting (*International UE congress*), Lisbon (Portugal), 14th-15th of November 2016.

- Invited participation to the scientific organization of the topics of this COST action (various Oral contributions), Gianluca Calcagni.

European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2016–Gas on the Rocks (*International UE congress*), Madrid (Spain), 21st-25th of November 2016.

- *New experiments and assignments of the torsional spectrum of dimethyl-ether* (Poster), J. M. Fernández, G. Tejada, M. Carvajal, and M. L. Senent.
- *Structural and Spectroscopic Characterization of Methyl Isocyanate and Various Isomers using highly correlated ab initio methods* (Poster), S. Dalbouha, M.L. Senent, N. Komiha and N. Jaïdane.

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

Third Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure: The Many Facets of Nuclear Structure (*International workshop*), Bormio (Italy), 22nd-28th of February 2016.

- *Gamma detected in the break-up of ¹³Be* (Invited talk), O. Tengblad, E. Náchter, G. Ribeiro and B. Jonson.
- *Decay spectroscopy in the ¹³²Sn region* (Invited talk), A. Jungclaus.
- *The Gamow-Teller resonance populated in the beta decay of neutron-deficient nuclei above ¹⁴⁶Gd* (Invited talk), E. Náchter et al.

MOLIM 2016, COST Molecules in Motion WG3 Meeting 2016 (*UE congress*), Bratislava (Slovak Republic), 21st-22nd of March 2016.

- *Hydrogen Interaction with Carbon Nanostructures: Sensitive Probing Using Neutron Scattering* (Oral presentation), C. Cabrillo, R. Fernández-Perea.
- *Atomistic Simulations of Soft-Landing Processes* (Oral Presentation), R. Fernández-Perea.

2nd International Conference on Innovation in Art Research and Technology (InArt 2016) (*International non-UE congress*), Ghent (Belgium), 21st-25th of March 2016.

- *SERS analysis of basic and acid early synthetic dyes on wool* (Poster), María Vega Cañamares, Chiara Deriu, Rocco Mazzeo, Silvia Prati, Santiago Sánchez-Cortés.

Chemical Energy at the Nanoscale: Simulation Meets Experiment (CEAM) (*UE congress*), Zaragoza (Spain), 5th - 7th of April 2016.

- *Molecules and metallic nanodroplets meet carbon nanostructures* (Invited talk), C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, F.J. Bermejo.

The 6th Amazon & Pacific Green Materials Congress and Sustainable Construction Materials. LAT-RILEM Conference (*International non-UE congress*), Cali (Colombia), 27th-29th of April 2016.

- *Scientific and technical behaviour of blended cement made from coal mining waste* (Oral presentation), M. Frías, M.I. Sánchez De Rojas, H. Sabastano J., R. García, R. Vigil De La Villa, I. Vegas, S. Martínez- Ramírez.

Fostering Excellence in Multiscale Cell Imaging. Final Meeting (*International non-UE congress*), Kosice (Slovakia), 10th-12th of May 2016.

- *Plasmonic-Enhanced Raman Scattering applied in the detection of pollutants and drugs at trace concentrations* (Invited Lecture), S. Sánchez-Cortés.

99th Canadian Chemistry Conference (*International non-UE congress*), Halifax (Canada), 5th-9th of June 2016.

- *Abiotic Degradation of Triazine pesticides revealed by surface-enhanced Raman scattering* (Invited lecture), S. Sánchez-Cortés, R. Rubira, C.J.L. Constantino, M.V. Cañamares and J.V. García Ramos.
- *New Approaches in Metal Enhanced Spectroscopies (SERS and SEF): Tailoring the Size and Shape of Silver Nanoparticles with Outstanding Plasmonic Properties* (Invited Lecture), J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, A. García-Leis.

XIV Congreso Nacional de Materiales (*National congress*), Gijón (Spain), 8th-10th of June 2016.

- *Estériles de carbón como fuente de obtención de puzolanas base metacaolinita* (Oral presentation), M. Frías, R. Vigil De La Villa, R. García, I. Vegas, S. Martínez- Ramírez.

Direct Reactions with Exotic Beams (DREB2016) (*International non-UE congress*), Halifax (Canada), 11th-15th of July 2016.

- *¹³Be studied by (p,2p) deep inelastic scattering reaction in complete kinematics* (Oral contribution), O. Tengblad, G. Ribeiro and E. Nácher.

XXV Reunión Nacional de Espectroscopía-IX Congreso Ibérico de Espectroscopía (*National congress*), Alicante (Spain), 20th-22nd of July 2016.

- *Calcium Silicate Hydrate Synthesis* (Oral presentation), M. Martín-Garrido, S. Martínez- Ramírez.
- *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanowires: Tailoring Light Harvesting and Emission at the Nanoscale* (oral presentation), D.R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, A. D. Van Dam, B.J.M. Brenny, A. Polman, J. Gómez Rivas and J.A. Sánchez-Gil.
- *Abiotic Degradation of Triazine pesticides Analyzed with surface-enhanced Raman scattering* (Poster), S. Sánchez-Cortés, R. Rubira, C.J.L. Constantino, M.V. Cañamares and J.V. García-Ramos.
- *SERS analysis of red lakes paints: coated glass slides and cross sections* (Poster), M. S. Zalaffi, M.V. Cañamares, S. Prati and S. Sánchez-Cortés.

7th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'16) (*International non-UE congress*), Málaga (Spain), 25th-28th of July 2016.

- *Localized magnetic plasmons in all-dielectric structures* (Invited talk), R. Paniagua-Domínguez, L. Froufe-Pérez, J.J. Sáenz, J.A. Sánchez-Gil.
- *Semiconductor Nanowire antennas* (Poster), J. Gómez Rivas, D. Van Dam, J.E.M. Haverkort, E.P.A.M. Bakkers, D.R. Abujetas, J.A. Sánchez-Gil.
- *Subwavelength flat-lensing of hybrid nanowire metamaterial with low-loss, isotropic optical negative-index behavior* (Contributed talk), D. R. Abujetas, R. Paniagua-Domínguez, M. Nieto-Vesperinas, J. A. Sánchez-Gil.

33rd European Congress on Molecular Spectroscopy (*International*), Szeged (Hungría), 30th of July-4th of August 2016.

- *Synthesis, conformational and pharmacological study of alcohols derived from 3-methyl-3-azabicyclo[3.2.1]octane* (poster), I. Iriepa and J. Bellanato.

XXV International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS) (*International non-UE congress*), Fortaleza (Brazil), 14th-19th of August 2016.

- *Abiotic Degradation of Triazine pesticides Analyzed with surface-enhanced Raman scattering* (Invited Lecture), S. Sánchez-Cortés, R. Rubira, C.J.L. Constantino, M.V. Cañamares, J.V. García-Ramos.

R3B Collaboration Meeting (*International non-UE congress*), Gatchina (Russia), 19th-23th of September 2016.

- *Gamma detected in the $^{14}\text{B}(p,2p)^{13}\text{Be}$ reaction* (Oral contribution), O. Tengblad.

11th Conference on Lasers in the Conservation of Artworks (LACONA XI) (*International non-UE congress*), Krakow (Poland), 19th-23rd September 2016.

- *SERS analysis of Fuchsin and Diamond Green G on Ag nanoparticles prepared by photoreduction* (Poster), M.V. Cañamares, F. Gallazzi, I. Bonacini, S. Prati, S. Sánchez-Cortés.
- *Wavelength effects on the laser removal of lichens on heritage stone* (Oral contribution), M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, R. Fort, A. de los Ríos, J. Wierzchos, M.V. Cañamares, M. Castillejo.

5th International Conference-Youth in Conservation of Cultural Heritage (YOCOUCU 2016) (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 21st-23rd of September 2016.

- *^{29}Si and ^1H NMR study of waterproofing polymerization* (Oral presentation), C. Fortes-Revilla, M.T. Blanco-Varela, S. Martínez-Ramírez.
- *Calcium silicate hydrate characterization by spectroscopic techniques* (Poster), M. Martín-Garrido, S. Martínez-Ramírez, G. Pérez, A. Guerrero.
- *Conservation of a colossal statue of Zeus from Soluntum (Sicily, Italy): Scientific and historical remarks about previous restorations* (Oral presentation), M. F. Alberghina; M. Álvarez de Buergo; S. Martínez-Ramírez; G. Milazzo; S. Schiavone; F. Spatafora.
- *Active conservation of ceramic building materials: removal of lichens on roof tiles by laser and biocides treatments* (Poster), J. Pena-Poza, S. Pérez-Ortega, M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, J. Wierzchos, A. de los Ríos, M. Urizal, M. V. Cañamares, M. Castillejo, V. Souza-Egipsy, M. García-Heras, and M. A. Villegas.

LIX Congreso Nacional de Física de la Sociedad Mexicana de Física (*National non-UE congress*), Ciudad de León (Mexico), 3rd-7th of October 2016.

- *Controlling light emission, scattering, and propagation at the nanoscale with metal, semiconductor and hybrid nanowires* (Plenary talk), J.A. Sánchez-Gil.

2nd MOLIM General Meeting (*UE congress*), Dubrovnik (Croatia), 10th-12th of October 2016.

- *Solved and Unsolved Problems in Modelling Superfluid Helium Nanodroplet-Mediated Synthesis and Soft-Deposition of a New Generation of Metallic Nanoparticles* (Invited talk), M. Pilar de Lara-Castells, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, A.O. Mitrushchenkov, M. Pi and Elena Voloshina.

5th Baskrete Open Days to Industry (BASKRETE 2016) (*National congress*), San Sebastian (Spain), 10th-11th of November 2016.

- *Characterization of cements. New approaches for the identification of minor elements* (Oral presentation), S. Martínez-Ramírez.

VIII Jornadas CPAN (*National congress*), Zaragoza (Spain), 28th-30th of November 2016.

- *Multi-particle emission from ^{31}Ar at IDS* (Invited talk), I. Marroquín.
- *Detection of gamma-rays in the reaction $^{14}\text{B}(p,2p)^{13}\text{Be}$ and its importance to interpret the structure of ^{13}Be* (Oral contribution), E. Nácher, G. Ribeiro, O. Tengblad and B. Jonson.

I Congreso Nacional PRE-CONPAT 16 ESPAÑA (*National congress*), Madrid (Spain), 2nd of December 2016.

- *Influencia de residuos de carbón activado en la evolución térmica de morteros eco-eficientes* (Oral presentation and Poster), M. Frías M, S. Martínez-Ramírez, R. García, R. Vigil De La Villa, L. Fernández-Carrasco, I. Vegas, and M.I Sánchez de Rojas.

ISOLDE Physics Workshop and Users Meeting 2016 (*International non-UE congress*), CERN (Geneva, Switzerland), 7th-9th of December 2016.

- *Multi-particle emission from ^{31}Ar at IDS* (Invited talk), I. Marroquín, and M.J.G. Borge.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Astrophysical ices in the lab (*International non-EU congress*), CSIC, Madrid (Spain), 7th-8th of March 2016.

- *Infrared spectroscopy of carbonaceous interstellar dust analogues deposited by PECVD: effects of processing by high energy electrons* (Oral), Isabel Tanarro, Miguel Jiménez-Redondo, Germán Molpeceres, Belén Maté, and Víctor J. Herrero
- *Laboratory astrophysics at IEM: overview of recent results* (Plenary), V.J. Herrero
- *Theoretical calculations on HACs* (Oral) V. Timón
- *Modelling CO/H₂O ice mixtures* (Oral) R. Escribano
- *Stability of glycine to energetic processing under astrophysical conditions investigated via infrared spectroscopy* (Oral) Belén Maté, Víctor J. Herrero, Isabel Tanarro and Rafael Escribano
- *Methane/Ethane binary mixtures under astrophysical conditions* (Oral) Germán Molpeceres, Miguel Ángel Satorre, Juan Ortigoso, Carlos Millán, Rafael Escribano and Belén Maté

Complex Organic Molecules in Space: Gas-Phase Routes and Isotopic Enrichment, First Annual Meeting of the WG1/WG4 COST Action #1401 "Our Astrochemical History" (*UE congress*), Pisa (Italy), 7th-8th of March 2016.

- *The torsional spectrum of dimethyl-ether. New experiments and assignment* (Oral Contribution), J. M. Fernández, G. Tejada, M. Carvajal, and M. L. Senent

EGU General Assembly 2016. Vienna (Austria) 17th-22th of April 2016.

- *Metastable Nitric Acid Trihydrate in Ice Clouds* (Poster). F. Weiss, F. Kubel, Ó. Gálvez, M. Hoelzel, S. F. Parker, R. Iannarelli, M. J. Rossi and H. Grothe

ECONOS 2016 (*International non-EU*), Gothenburg (Sweden), 24th-27th of April 2016.

- *High resolution stimulated Raman spectroscopy from collisionally populated states after optical pumping. Acetylene isotopologues in the 3800-39020 cm⁻¹ and 5800-5900 cm⁻¹ regions.* (Poster), Dionisio Bermejo, Raúl Martínez, Ginafranco Di Lonardo, and Luciano Fusina.

International Symposium on Molecular Spectroscopy, 71st Meeting (*International non-UE congress*), Champaign-Urbana, Illinois, USA 20th-26th of June 2016.

- *High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of ν_2 and ν_3 bands of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ using the D_2h top data system* (Oral presentation), Abdulsamee Alkadrou, Maud Rotger, Dionisio Bermejo, José-Luis Doménech, and Vincent Boudon.

60 Years of Molecules, Motion and Matrix Elements (*International non-EU*), Gaithersburg MD (USA), 27th-28th of June 2016.

- *The torsional spectrum of dimethyl-ether. New experiments and assignment* (Oral Contribution), M.L. Senent, M. Carvajal, J.M. Fernández, and G. Tejada.

A laboratory spectroscopy workshop for astrophysics ALABASTRO (*International, EU congress*), Jaca (Spain), 27th-30th of June 2016.

- *Introduction to spectroscopy* (Oral) Rafael Escribano
- *Spectroscopy of plasmas of astrophysical interest* (Oral), Victor Herrero.
- *Spectroscopy of carbonaceous dust* (Oral) Victor Herrero.
- *Inelastic molecular collisions of Astrophysical interest* (Oral Contribution), J.M. Fernández
- *Infrared optical constants and band strengths of ices* (Oral) Belén Maté
- *Phyllosilicates in space* (Oral) Vicente Timón.
- *Structure and Spectra of Hydrogenated Amorphous Carbon: A DFT comparison between proposed models* (Poster), G. Molpeceres, V. Timón, M. Jiménez-Redondo, M.A. Moreno, V.J. Herrero, R. Escribano, B. Maté and I. Tanarro

XXIII Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, ESCAMPIG XXIII. (*International EU congress*) Bratislava, Slovakia, 12th-16th of July 2016.

- *Processing by electron bombardment of α -C:H interstellar dust analogues grown by PECVD* (Poster). Germán Molpeceres, Miguel Jiménez-Redondo, Belén Maté, Víctor J. Herrero, Elena López-Elvira, Javier Méndez, Isabel Tanarro.
- *Modeling of plasma deposited analogues of interstellar carbonaceous dust* (Poster) Germán Molpeceres, Miguel Jiménez-Redondo, Vicente Timón, Miguel Ángel Moreno, Víctor J. Herrero, Rafael Escribano, Belén Maté, Isabel Tanarro.

XXV Reunion Nacional de Espectroscopía- IX Congreso Ibérico de espectroscopía (*International, EU congress*), Alicante (Spain), 20th-22th of July 2016.

- *Theoretical models for the spectroscopy of methane/ethane ice mixtures* (Poster), R. Escribano, G. Molpeceres, M.A. Satorre, C. Millán, J. Ortigoso, and B. Maté
- *Modelling and irradiation experiments of cosmic dust analogues* (Oral), G. Molpeceres, M. Jiménez Redondo, V. Timón, M.A. Moreno, V.J. Herrero, R. Escribano, B. Maté, and I. Tanarro
- *Diffusion measurements of methane in amorphous water ice* (Poster) B. Maté, G. Molpeceres, J. Ortigoso, I. Tanarro, and V.J. Herrero.

Gordon Research Conference 2016, Plasma Processing Science (*International non-EU congress*), Proctor Academy, Andover, NH (USA), 24th-29th of July 2016.

- *Cold Plasmas in Laboratory Astrochemistry: Protonated Ions and Carbonaceous Dust Analogs*, (Invited talk) I. Tanarro, V.J. Herrero, J.L. Doménech, B. Maté, M. Jiménez-Redondo, M. Cueto, G. Molpeceres, J. Cernicharo, B. Alemán, J. R. Pardo, R. J. Peláez, P. de Vicente, and J. D. Gallego.
- *Plasma Generated Analogs of Interstellar Carbonaceous Dust: Theoretical Modeling and Electron Bombardment* (Poster) V.J. Herrero, I. Tanarro, G. Molpeceres, V. Timón. B. Maté, M. Jiménez-Redondo and R. Escribano.

The 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (*International non-EU congress*), Prague (Czech Republic), 30th of August-3rd of September 2016.

- *High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of line positions and assignments for the v2 and v3 bands of ¹³C₂H₄*. (Poster), A. Alkadrou, M. Rotger, D. Bermejo, J.L. Doménech and V. Boudon.
- *High-resolution stimulated Raman spectroscopy from collisionally populated states after optical pumping-Acetylene isotopomers* (Poster), D. Bermejo, R. Z. Martínez, G. Di Lonardo, and L. Fusina.
- *Spectral shape of nitrogen-broadened methane lines*. (Poster). Tuong Le, José-Luis Doménech, Muriel Lepère, and Ha Tran.

XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems MOLEC 2016 (*EU congress*), Toledo (Spain), 11th-16th of September 2016.

- *Probing Molecular Collisions by Raman Spectroscopy* (Oral Contribution), J.M. Fernández, G. Tejada, and S. Montero.

Ice Age. The Era of the James Webb Space Telescope. Workshop. Leiden (The Netherlands) 4th-7th of October 2016.

- Participación bajo invitación: Víctor Herrero, and Belén Maté.

Workshop on interstellar matter (*International non-EU congress*), Hokkaido University, Sapporo (Japan), 19th-21st of October 2016.

- *Analogs of interstellar carbonaceous dust: processing by electron bombardment and theoretical modeling* (Poster), V.J. Herrero, G. Molpeceres, B. Maté, V. Timón, M. Jiménez Redondo and I. Tanarro.
- *Simulations of CH₄/H₂O ices as models for TNOs* (Poster), R. Escribano, B. Maté, G. Molpeceres, P.C. Gómez, and M.A. Satorre.
- *Infrared spectra of ice mixtures: methane/ethylene* (Poster), G. Molpeceres, M.A. Satorre, J. Ortigoso, C. Millán, R. Escribano, V.J. Herrero, I. Tanarro, R. Luna and B. Maté.

Bisannual conference of the French National Programme INSU/PCMI- Physique et Chimie des Milieux Interstellaire et Circumstellaire (*EU congress*), Lille (France), 24th-28th of October 2016.

- *Astronomical radio reception techniques to detect the emission of molecular and short lived species in a cold plasma/gas chamber* (Oral) J. Cernicharo, I. Tanarro, B. Alemán, V. Herrero, P. de Vicente, and J.D. Gallego.

Energy and Environment Knowledge Week Congress (E2KW) ECLA (*International, EU congress*), Paris (France) 28th-29th of October 2016.

- *Heterogeneous reaction of ozone with KI nanoparticles* (Poster) M.T. Baeza-Romero, O. Gálvez, M. Sanz, C. García, V. López-Arza and O. Andrés Brocho.

European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA (*International, non-EU congress*), Madrid (Spain), 21st-25th of November 2016

- *Infrared spectroscopy of protonated ions* (Invited Lecture), J.L. Doménech, M. Cueto, V. J. Herrero, I. Tanarro, and J. Cernicharo.
- *Structure and spectra of models of HAC particles* (Poster), Germán Molpeceres, Vicente Timón, Miguel Jiménez-Redondo, Miguel Ángel Moreno, Víctor J. Herrero, Rafael Escribano, Belén Maté and Isabel Tanarro.
- *Electron irradiation of a-C:H deposits: Effects of cosmic rays on interstellar carbonaceous dust*, (Póster), Belén Maté, Germán Molpeceres, Miguel Jiménez-Redondo, Isabel Tanarro, Rafael Escribano, and Víctor J. Herrero.

- *Diffusion of methane on amorphous solid water* (Poster), Germán Molpeceres, Juan Ortigoso, Isabel Tanarro, Víctor J. Herrero, Rafael Escribano and Belén Maté.
- *Theoretical and experimental UV-VIS spectra of phyllosilicates with astronomical implications* (Poster), V. Timón and F. Colmenero.
- *Astronomical radioreception techniques to detect the emission of molecular and short lived species in a cold plasma/gas chamber* (Poster), I. Tanarro, B. Alemán, R. J. Peláez, V. J. Herrero, J. L. Doménech, P. de Vicente, F. Tercero, A. Díaz, J. D. Gallego, J. A. López Pérez, J. A. López Fernández, J. Sobrado, J. R. Pardo, K. Lauwaet, G. Santoro, J. A. Martín-Gago and J. Cernicharo.
- *Spectroscopy of Methane/Ethylene mixtures* (Poster), G. Molpeceres, M. A. Satorre, J. Ortigoso, C. Millán, R. Escribano, V. Herrero, I. Tanarro, R. Luna, and B. Maté.
- *RIGS: Radiofrequency Interstellar Gas System for Molecular Spectroscopy* (Poster), B. Alemán, K. Lauwaet, J. Sobrado, G. Santoro, P. de Vicente, F. Tercero, A. Díaz, J. D. Gallego, J. A. López Pérez, J. A. López Fernández, J. R. Pardo, I. Tanarro, V.J. Herrero, R. J. Peláez, J. L. Doménech, J. A. Martín-Gago, and J. Cernicharo.
- *Experimental study of state-to-state rates for elementary inelastic collision processes involving He, H₂, and H₂O species* (Oral Contribution), S. Montero, G. Tejeda, and J. M. Fernández.
- *New experiments and assignments of the torsional spectrum of dimethyl-ether* (Poster), J. M. Fernández, G. Tejeda, M. Carvajal, and M. L. Senent.
- *H₂O-He and H₂O-H₂O collisions: pressure broadening and rate coefficients* (Poster), M. I. Hernández, J. Campos-Martínez, J. M. Fernández, G. Tejeda, and S. Montero.

The hydride toolbox (*International non-EU congress*), Paris (France), 12th-15th of December 2016.

- *The high resolution vibration rotation spectrum of HCl⁺* (Oral) José L. Doménech, Brian Drouin, José Cernicharo, Víctor J. Herrero, and Isabel Tanarro.

American Geophysical Union Fall Meeting (*International non-EU congress*), San Francisco (USA), 12th-16th of December 2016.

- *Theoretical models for ice mixtures in outer solar system bodies* (Poster), R. Escribano, P.C. Gómez, G. Molpeceres, V. Timón, M.A. Moreno, and B. Maté.

4.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

DESY Users' Meeting, SAXS/WAXS/GISAXS Workshop (*UE congress*), Hamburg (Germany), 28th of January 2016.

- *Nanofabrication of Laser Induced Periodic Surface Structures on Polymer Thin Films as Revealed by Grazing Incidence X-ray Scattering* (Invited Conference), T.A. Ezquerro.

Second CCPBioSim/CCP5 Multiscale Modelling Conference (*International non-UE congress*), Manchester (UK), 13th-15th of April 2016.

- *Coarse-graining simulations of the crystallization process of short chain branched polyolefins* (Poster), J. Ramos, S. Sanmartín, J. F. Vega and J. Martínez Salazar.
- *Conformation and hydrodynamics of HER2-Transtuzumab complexes: experiments and multiscale simulations* (Poster), J. F. Vega, J. Ramos, P. Hu, J. Cortés and J. Martínez Salazar.

E-MRS 2016 Spring Meeting (*International non-UE congress*), Strasbourg (Francia), 2nd-6th of May 2016.

- *Simultaneous laser induced periodic nanostructuring and diffraction-assisted micropatterning of thin polymer films* (Oral), E. Rebollar, J.J. Hernández, D.E. Martínez-Tong, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, and M. Castillejo.
- *In situ monitoring of Laser Induced Periodic Surface Structures on conjugated polymers of interest in Organic Photovoltaics* (Oral), Á. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, M.C. García-Gutiérrez, D. R. Rueda, G. Portale, M. Castillejo, and T.A. Ezquerro.
- *Formation of polymer nanoparticles by UV pulsed laser ablation of poly(bisphenol A carbonate) in liquid environment* (Poster), Daniel E. Martínez-Tong, Esther Rebollar, Mikel Sanz, Tiberio A. Ezquerro, Aurora Nogales, and Marta Castillejo.

The 24th Annual Forum on Advanced Materials (POLYCHAR 24) (*International non-UE congress*), Poznan (Poland), 9th-13th of May 2016.

- *The overlooked role of graphene in the reinforcement of hydrophilic polymers* (Oral contribution), A. Flores, H. J. Salavagione, F. Ania, G. Martínez, G. Ellis, and M. A. Gómez-Fatou.
- *Mapping a polymer banded spherulite by nanoindentation* (Poster), P. Enrique, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, F. Ania, and A. Flores.
- *Session chair: Characterization and structure-properties relations*, F. Ania.

XIV Congreso Nacional de Materiales (*National congress*), Gijón (Spain), 8th-10th of June 2016.

- *LIPSS formation by nanosecond laser irradiation of Poly(ethylene terephthalate) reinforced with Expanded Graphite* (Oral), R. I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernández, T. A. Ezquerro, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Castillejo, P. Moreno and E. Rebollar

17th European Conference on Composite Materials (ECCM17) (*UE congress*), Munich (Germany), 26th-30th of June 2016.

- *Hierarchical polypropylene nanocomposites based on graphene and carbon fibers* (Oral contribution), S. Quiles-Díaz, H. J. Salavagione, P. Enrique-Jiménez, A. Flores, F. Ania and M. A. Gómez-Fatou.

Nano 2016 Conference (*International non-UE congress*), Québec City (Canada), 7th-12th of August 2016.

- *Structure confinement in organic solar cells: influence on electrical properties at the nanoscale* (Oral contribution), A. Rodríguez-Rodríguez, E. Rebollar, T. Ezquerro, M.C. García-Gutiérrez.

10th International Conference on Photoexcited Processes and Applications, (*International non-UE congress*), Brasov (Romania), 29th of August-2nd of September 2016.

- *Laser fabrication of polymer ferroelectric nanostructures. Application for non-volatile organic memory devices* (Invited Conference), J. Cui, M. Hernández, D.E. Martínez-Tong, A. Rodríguez-Rodríguez, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerro, and E. Rebollar.

XIV Reunión del Grupo Especializado de Polímeros (RSEQ, RSEF) (*National congress*), Burgos (Spain), 5th-8th of September 2016.

- *Estudio del bandeo en esferulitas de poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxivalerato) mediante nanoindentación* (Oral contribution), P. Enrique-Jiménez, J. F. Vega, J. Martínez-Salazar, F. Ania and A. Flores.
- *Nanocompuestos de polipropileno basados en grafeno* (Invited talk), S. Quiles-Díaz, H. J. Salavagione, P. Enrique, A. Flores, F. Ania and M. A. Gómez-Fatou.

International Conference of Biodeterioration & Protection of Cultural Heritage (*International non-UE congress*), Lodz (Poland) 8th-9th of September 2016.

- *Biocide and laser treatments to slow down biodeterioration processes in Stone* (Oral contribution), A. de los Ríos, S. Pérez-Ortega, M. Sanz, M. Oujja, M. Castillejo, J. Wierzchos, V. Souza-Egipsy, R. Fort, M. Álvarez de Buergo, and C. Ascaso.

9th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its applications (*International non-UE congress*), Pisa (Italy), 11th-16th of September 2016.

- *Structure-dynamics relationship in biobased polyesters of 1,3-propanediol as revealed by dielectric spectroscopy* (Oral), M. Soccio, L. Genovese, A. Linares, N. Lotti, A. Munari, A.Szymczyk, Z. Roslaniec, A. Nogales, and T.A. Ezquerro.
- *Dielectric Relaxation and Electrical Conductivity of Poly(3-hexylthiophene) and its blends with fullerene: from bulk to thin films* (Oral), J. Cui, A. Nogales, A. Rodríguez-Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, E. Rebollar, and T.A. Ezquerro.

The 4th International Conference on Nanomechanics and Nanocomposites (*International non-UE congress*), Vicenza (Italy), 14th-17th of September of 2016.

- *Poly(trimethylene terephthalate) based nanocomposites containing carbon nanoparticles* (Oral Contribution), S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, I. Irska, E. Piesowicz, A. Linares, T.A. Ezquerro, and Z. Roslaniec.

11th Conference on Laser in the Conservation of Artworks (*UE congress*), Cracow (Poland) 19th-23rd of September 2016.

- *Wavelength effects on the laser removal of lichens on heritage Stone* (Oral contribution), M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, S. Pérez-Ortega, V. Souza-Egipsy, R. Fort, A. de los Ríos, J. Wierzchos, M.V. Cañamares, and M. Castillejo.

5th YOCOCU 2016, Youth in Conservation of Cultural Heritage (*International*), Madrid (Spain), 21st-23th of September 2016.

- *Active conservation of ceramic building materials: removal of lichens on roof tiles by laser and biocides treatments* (Poster), J. Peña-Poza, S. Pérez-Ortega, M. Sanz, M. Oujja, C. Ascaso, J. Wierzchos, A. de los Ríos, M. Urizal, M.V. Cañamares, M. Castillejo, V. Souza-Egipsy, M. García-Heras, and M.A. Villegas.

AIMEN Jornadas de Procesado de Materiales con Láser (*International non-UE congress*), O Porriño (Pontevedra), 29th-30th of September of 2016.

- *LIPSS formation by nanosecond laser irradiation of Poly(ethylene terephthalate) and Poly(trimethylene terephthalate) reinforced with carbon-based fillers* (Oral Contribution), René I. Rodríguez-Beltrán, Margarita Hernández, Tiberio A. Ezquerro, Sandra Paszkiewicz, Anna Szymczyk, Zbigniew Roslaniec, Marta Castillejo, Pablo Moreno, and Esther Rebollar.

Frontiers in Optics/Laser Science (*International non-UE congress*), Rochester (USA), 17th-20th of October 2016.

- *Formation of LIPSS in nanocomposites of Poly (ethylene terephthalate)/Expanded Graphite by using UV nanosecond laser pulses* (Poster), R. I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernandez, T. A. Ezquerro, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Castillejo, P. Moreno, and E. Rebollar.

Seminario de Jóvenes Investigadores en Polímeros ICTP-CSIC (*International non-UE congress*), Madrid (Spain), 25th of October 2016.

- *Fabricación láser de nanoestructuras periódicas en polímeros reforzados con aditivos carbonosos*, (Ponencia oral), R. I. Rodríguez-Beltrán, M. Hernández, T. A. Ezquerro, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, Z. Roslaniec, M. Castillejo, P. Moreno, and E. Rebollar.
- *Preparación de nanopartículas de PVDF y P(VDF-TrFE)* (Oral), Edgar Gutiérrez, Jing Cui, Tiberio A. Ezquerro, Mari-Cruz García-Gutiérrez, Esther Rebollar, and Aurora Nogales.

GISAXS2016 (*International non-UE congress*), Hamburg (Germany) 16th-18th of November 2016.

- *On the application of Grazing Incidence X-ray Scattering to characterize functional gratings: from polymer systems to fullerene grooves* (Invited Conference), T.A. Ezquerro.

4.2 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / VISITORS

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

- ❖ **Dr. Tobias Kramer**, Humboldt Universität and Zuse Institut, Berlin, Germany, 11th-13th of January 2016.
- ❖ **Javier A. Olmedo Nieto**, Louisiana State University, Baton Rouge, USA, 30th of January-5th of February 2016, and 22nd of February-4th of March 2016.
- ❖ **Dr. Daniel Martín de Blas**, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile, 17th of April-8th of May 2016.
- ❖ **Prof. Yang Zhao**, Nanyang Technological University, Singapore, 5th-18th of June 2016.
- ❖ **Dennis Hove**, Institute of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 5th of September 2016-3rd of February 2017.
- ❖ **Gerardo Ortiz**, Indiana University, USA, 12th-17th of September 2016.
- ❖ **Prof. Tobías Frederico**, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Sao José dos Campos, Brazil, 22nd-30th of October 2016.
- ❖ **Prof. Aksel Jensen**, Institute of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark, 24th of October-4th of November 2016.
- ❖ **Michele Ronco**, University "La Sapienza", Rome, Italy, 25th of October-29th of November 2016.

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

- ❖ **Ms. Klara Retko**, Ph.D. student. Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia, 18th of January-17th of June 2016.
- ❖ **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, "P. J. Safarik of Kosice" University, Slovak Republic, 2nd-14th of February, 18th-28th of November 2016.
- ❖ **Dr. Gabriela Fabriciova**, Assistant Professor, "P. J. Safarik of Kosice" University, Slovak Republic, 7th-13th of March 2016.
- ❖ **Mr. Lorenzo Tinacci**, Erasmus Student, Università degli Studi di Firenze, Italy, 1st of April-31st of July 2016.
- ❖ **Prof. John R. Lombardi**, Full Professor. Department of Chemistry. City College, City University of New York, USA, 3rd-6th of April 2016.

- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Full Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 16th-30th of April, 24th-28th of May 2016.
- ❖ **Prof. Alessandro Feis**, Full Professor, Università degli Studi di Firenze, Italy, 17th-25th of April, 24th-26th of November 2016.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Associated Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 19th-31st of May 2016.
- ❖ **Dr. Zuzana Nad’ova**, Assistant Professor, “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 25th-28th of May 2016.
- ❖ **Mr. Rodrigo Sánchez**, Predoctoral Student. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile, 31st of May-31st of July 2016.
- ❖ **Dr. Belén Hernández**, Associated Professor, “Paris XIII” University, Paris, France, 1st-5th of June, 20th-22nd of July, 2nd-6th of November 2016.
- ❖ **Prof. Mahmoud Ghomi**, Full Professor, “Paris XIII” University, Paris, France, 1st-5th of June, 20th-22nd of July, 2nd-6th of November 2016.
- ❖ **Ms. Elisabeth Imbarak**, Predoctoral Student. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile. 15th of June-28th of October 2016.
- ❖ **Juana Gabriela Calvillo**, Departamento de Óptica, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, CICESE, México, July-December 2016.
- ❖ **Miguel Ángel González**, Departamento de Óptica, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, CICESE, México, July-September 2016.
- ❖ **Dr. Carlos Garrido**, Associated Professor, Universidad de Chile, Santiago de Chile, 8th-23rd of July 2016.
- ❖ **Prof. Marcelo Campos**, Full Professor, Universidad de Chile, Santiago de Chile, 8th-23rd of July 2016.
- ❖ **Dr. Andrea Ertani**, Postdoctoral Student. Università degli Studi di Padova, Italy. 16th-31st of July 2016.
- ❖ **Prof. Eugenio R. Méndez**, Departamento de Óptica, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, CICESE, México, 16th-29th of July 2016.
- ❖ **Dr. Álvaro Aliaga**, Associated Professor, Universidad de Chile, Santiago de Chile, 21st of September-15th of October 2016.
- ❖ **Prof. Giulietta Smulevich**, Full Professor, Università degli Studi di Firenze, Italy, 24th-26th of November 2016.

4.3 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / INVITED RESEARCHERS CONFERENCES

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

Dr. Tobias Kramer.

Universität Humboldt and Zuse Institut, Berlin (Germany).

Modelling energy transfer dynamics in photosynthesis: the interplay of coherence and dissipation.

12th of January 2016.

D. Alejandro Somoza.

Nanyang Technological University (Singapore) and Ulm University (Germany).

Quantum effects in photosynthetic and photovoltaic systems.

24th of June 2016.

Dr. Diego Rubiera.

Universidade de Lisboa, Lisboa (Portugal).

Learning to Live with Space-Time Singularities with the Help of Non-Riemannian Geometry.

30th of September 2016.

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

D. Francisco Pedro.

IFT, UAM-CSIC, Madrid.

Higher Derivative Actions and Inflation in String Theory.

11th of January 2016.

Dr. Álvaro de la Cruz Dombriz.

Universidad Complutense, Madrid.

*Is Cosmography a Useful Tool to Target Extended Theories of Gravity?*26th of February 2016.**Dr. Javier Olmedo.**

Louisiana State University, Baton Rouge, USA.

*Colapso de materia cuántica autogravitante sobre una geometría cuántica.*1st of February 2016.**D. Santos J. Núñez Jareño.**

Universidad Complutense, Madrid.

*Fast Oscillating Fields Cosmology.*8th of February 2016.**Prof. Leonardo Fernández Jambrina.**

Universida Politécnica de Madrid, Madrid.

*Clasificación completa de singularidades cosmológicas.*22nd of February 2016.**D. Jorge Gigante Valcárcel.**

Universidad Complutense, Madrid.

*Einstein-Yang-Mills-Lorentz Black Holes.*7th of March 2016.**D. Franco D. Albareti.**

Universidad Autónoma, Madrid.

*Quantum Corrections to the Higgs Potential on a Curved Background.*4th of April 2016.**Dr. J. Fernando Barbero González.**

IEM, CSIC, Madrid.

*Hamiltonian Formulation of Parametrized Field Theories: Incorporating Boundaries and Gauge Symmetries.*18th of April 2016.**D. Michele Ronco.**

Università di Roma-La Sapienza, Roma (Italy).

*Spacetime-Noncommutativity Regime of Loop Quantum Gravity.*9th of May 2016.**D. Joao Morais.**

UPV, Bilbao.

*Late-Time Cosmology in $f(R)$ Gravity.*30th of May 2016.**Dr. Salvador Robles Pérez.**

Estación Ecológica de Biocología, Medellín (Badajoz).

*Observational Imprints of the Interacting Multiverse.*29th of September 2016.**Dra. Viviana Gammaldi.**

SISSA, Trieste (Italy).

*Indirect Searches of TeV Dark Matter at the Galactic Center.*13th of October 2016.**Dr. José A. R. Cembranos.**

Universidad Complutense, Madrid.

*Didáctica de materia oscura.*27th of October 2016.

Dr. Álvaro de la Cruz Dombriz.

University of Cape Town and National Institute for Theoretical Physics (NITheP), Cape Town (South Africa).
What Model-Independent Reconstruction Techniques really Say about Extended Theories of Gravity.
 10th of November 2016.

Prof. Antonio Dobado.

Universidad Complutense, Madrid.
Spontaneous Symmetry Breaking and the Unruh Effect.
 24th of November 2016.

D. Juan Margalef Bentabol.

Universidad Carlos III/IEM-CSIC, Madrid.
Playing with the Misner Space and the Topology.
 15th of December 2016.

International Loop Quantum Gravity Seminar---Phone seminar, joint with 20 international institutions.**Prof. Jerzy Lewandoski.**

Warsaw University (Poland).
When Isolated Horizons Met Near Horizons Geometries.
 26th of January 2016.

Dr. Marc Geiller.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
LQG as an Extended TQFT.
 9th of February 2016.

Prof. Abhay Ashtekar.

Penn State, State College (USA).
Information Loss in Black Hole Evaporation.
 23rd of February 2016.

Dr. Sebastian Steinhaus.

University of Hamburg, Hamburg (Germany).
Numerical Indications for a Phase Transition in 4d Spin Foam Models.
 8th of March 2016.

Dr. Javier Olmedo.

Louisiana State University, Baton Rouge (USA).
Self Gravitating Shells in a Quantum Geometry.
 22nd of March 2016.

Dr. Wolfgang Wieland.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
Covariant Loop Quantum Gravity as a Topological Field Theory with Defects.
 5th of April 2016.

Prof. Parampreet Singh.

Louisiana State University, Baton Rouge (USA).
How Do Quantization Ambiguities Affect the Apacetime across the Central Singularity?
 19th of April 2016.

Profs. Cristian Fleischack, Emanuele Alesci, Jonathan Engle.

Paderborn (Germany), Warsaw (Poland), and Florida Atlantic (USA).
Panel on Symmetry Reduction: From LQG to LQC.
 3rd of May 2016.

Dr. Brajesh Gupta.

Penn State, State College (USA).
Quantum Gravity in the Sky: Interplay between Theory and Observations.
 30th of August 2016.

Prof. Madhavan Varadarajan.

Raman Research Institute, Bangalore (India).
Propagation in Polymer Parameterized Field Theory.
 13th of September 2016.

Dr. Daniele Pranzetti.

SISSA, Trieste (Italy).
CFT Degrees of Freedom from LQG Boundary Excitations.
 27th of September 2016.

Dr. Clement Delcamp.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
Fusion Basis for Lattice Gauge Theory and Loop Quantum Gravity.
 11th of October 2016.

Dr. Wolfgang Wieland.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
Loop Quantum Gravity from the Quantum Theory of Impulsive Gravitational Waves.
 25th of October 2016.

Dr. Simone Speziale.

Université Aix-Marseille, Marseille (France).
Progress in Twisted Geometries and Spin Foam Transition Amplitudes.
 8th of November 2016.

Prof. Hal Haggard.

Bard College, Annandale-On-Hudson (USA).
New Perspectives on Polyhedra.
 22nd of November 2016.

Dr. Aldo Riello.

Perimeter Institute, Waterloo (Canada).
The Observer's Ghost.
 6th of December 2016.

XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics---International Conference jointly organized with Universidad Carlo III, Universidad Politécnica de Madrid and ICMAT

Prof. Peter W. Michor.

Universität Wien, Austria.
Minicourse I: Introduction to infinite dimensional differentiable manifolds.
 29th of August-1st of September 2016.

Prof. Manuel Asorey Carballeira.

Universidad de Zaragoza, Spain.
Minicourse II: Introduction to quantum field theory.
 29th of August-1st of September 2016.

Dr. Patrizia Vitale.

Università degli Studi di Napoli Federico II, Italy.
The Gribov problem in noncommutative quantum field theory.
 30th of August 2016.

Dr. Ivan Yudin.

Universidade de Coimbra, Portugal.
Vaismann manifolds and Hard Lefschetz isomorphism.
 30th of August 2016.

Dr. Vladimir Salnikov.

University of Luxembourg.
Graded geometry in physics - above and beyond.
 30th of August 2016.

Dr. Miguel Ortega.

Universidad de Granada, Spain.

Translating solitons, semi-Riemannian manifolds and Lie groups.

30th of August 2016.

Dr. Juan Manuel Pérez-Pardo.

INFN-Sezione Napoli.

Quantum mechanics and information geometry.

30th of August 2016.

Dr. François Gay-Balmaz.

CNRS- École Normale Supérieure, France.

A variational Lagrangian formulation for nonequilibrium thermodynamics.

31st of August 2016.

Prof. Paul K. Townsend.

DAMTP, University of Cambridge, UK.

Worldline time reversal and massless supermultiplets.

1st of September 2016.

Dr. Marius Crainic.

University of Utrecht, The Netherlands.

Poisson manifolds of compact type.

1st of September 2016.

Dr. Cristina Sardón.

ICMAT-CSIC, Spain.

Hamilton-Jacobi theory on Nambu-Poisson manifolds.

1st of September 2016.

Dr. Janusz Grabowski.

Institute of Mathematics Polish Academy of Sciences, Poland.

Mechanics on graded bundles.

1st of September 2016.

Dr. Marcelo Epstein.

University of Calgary, Canada.

Material groupoids and algebroids.

1st of September 2016.

Dr. Florio Maria Ciaglia.

Università di Napoli Federico II, Italy.

Time, classical and quantum.

1st of September 2016.

Dr. Eva Miranda Galcerán.

Universitat Politècnica de Catalunya, Spain.

bm-Symplectic manifolds: going to infinity and coming back.

2nd of September 2016.

D. Miguel Domínguez Vázquez.

ICMAT-CSIC, Spain.

Isoparametric submanifolds of complex space forms.

2nd of September 2016.

Dr. Rui Loja Fernandes.

University of Illinois, USA.

Non-commutative integrable systems and isotropic realizations.

2nd of September 2016.

European Conference on the Dynamics of Molecular Systems---International Conference organized in Toledo (Spain), 11th-15th of September 2016 (29 invited speakers).

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

Prof. John R. Lombardi.

Department of Chemistry, City College, City University of New York.
Theory of Surface-Enhanced Raman Scattering in Semiconductors.
 5th of April 2016.

Prof. Giulietta Smulevich.

Università degli Studi di Firenze (Italy).
Molecular Dynamics and Resonance Raman Spectroscopy applied to heme proteins: how far can we go?
 25th of November 2016.

4.3.4. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Dr. Alberto Jiménez Suárez.

Universidad Rey Juan Carlos (Madrid).
Materiales multifuncionales basados en materiales compuestos de matriz epoxi reforzados con nanoestructuras de carbono.
 13th of April 2016.

Dr. Krzysztof Moorthi.

Mitsui Chemicals, Inc. (Japan).
Molecular Simulations of the structure and physical properties of polymers.
 18th of April 2016.

4.4 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES / VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS

(De una semana o más / Longer than a week)

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

Jorge Dukelsky Bercovich.

- Rice University, Houston (USA), 3rd-9th of April 2016.
- Indiana University, Indiana (USA), 4th-10th of September 2016.
- Rice University, Houston (USA), 11th-16th of September 2016.

Eduardo Garrido Bellido.

- Instituto Tecnológico de Aeronáutica, Sao José dos Campos (Brazil), 15th of May-1st of June 2016.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- Swansea University, Swansea (UK), 12nd-18th of September 2016.

Rafael Alejandro Molina Fernández.

- Zuse Institut, Berlin (Germany), 5th of July-18th of August 2016.
- Massachusetts Institute of Technology, Boston (USA), 3rd-8th of October 2016.
- Nanyang Technological University, Singapur, 14th-19th of November 2016.

Luis J. Garay Elizondo.

- Institute for Quantum Computing, Waterloo University (Canada), 3rd-17th of July 2016.
- University of Lisbon, Lisbon (Portugal), 15th-21st of May 2016.

Gianluca Calcagni.

- University of Rome La Sapienza, Rome (Italy), 17th-22nd of October 2016.

Beatriz Elizaga de Navascués.

- Radboud University, Nijmegen (The Netherlands), 29th of March-17th of May 2016.

Juan Margalef Bentabol.

- Technische Universität Wien, Vienna (Austria), 2nd of April-2nd of July 2016.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- Department of Biophysics, University “P. J. Safarik of Kosice”, Slovak Republic, 11th-25th February, 29th-19th of May, 30th of September-7th of October 2016.
- Universidad de Chile, Santiago de Chile, 3rd-16th of December 2016.

Olof Tengblad.

- CERN, IS605, Geneva, Switzerland, 11th-16th of May 2016.
- CERN, IS561, Geneva, Switzerland, 27th of October-5th of November 2016.
- PNPI, Gatchina, Rusia, 18th-26th of September 2016.

José A. Sánchez Gil.

- “P. J. Safarik of Kosice” University, Slovak Republic, 11th-17th of April 2016.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- Department of Biophysics, P. J. Safarik University, Kosice, Slovakia. 1st-8th of May 2016.

Irene Marroquín Alonso.

- CERN, Geneva, Switzerland, 2nd of May-1st of August 2016.
- CERN, Geneva, Switzerland, 24th of October-2nd of November 2016.

Enrique Nácher González.

- CERN, Geneva, Switzerland, 9th-25th of May 2016.

4.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Patricia Enrique Jiménez.

- University of Siegen, Germany, 2nd of May-28th of July 2016. Predoctoral Movility Program to perform short stays 2015.

Álvaro Rodríguez Rodríguez.

- Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Advanced Light Source (ALS), Berkeley (USA), 2nd of June-5th of September 2016.

Aurora Nogales Ruiz.

- Center for Functional Nanomaterials, Brookhaven National Lab (BNL), Upton-New York, (USA), 1st of July-30th of September 2016.

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

Rosa M^a Domínguez Gómez.

- Ciencia Medioambiental, Grado de Ingeniería Civil (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **February 2016, 12 hours.**
- Química de Materiales, Grado de Ingeniería Civil (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **February 2016, 83 hours.**

Luis J. Garay.

- Electrodinámica Clásica, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016- January 2017, 43 hours.**
- Métodos Matemáticos de la Física I, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016- January 2017, 60 hours.**
- Relatividad General y Gravitación, Grado de Física (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016- January 2017, 22 hours.**
- Universo, Espacio y Tiempo, Universidad para los mayores (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016- January 2017, 6 hours.**
- Quantum Field Theory in Curved Spacetimes (International), Universidad de Lisboa, **May 2016, 10 hours.**

Elvira Moya Valgañón.

- Energía Nuclear, Máster de Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 25 hours.**
- Estructura Nuclear, Máster en Física Nuclear (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **November 2016, 30 hours.**
- Trabajo Fin de Máster, Máster en Física Nuclear (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **October, 12,5 hours.**

Juan Margalef Bentabol.

- Cálculo (Grupos 82 y 86 de problemas), Grado en Ingeniería Informática (National Official), Universidad Carlos III de Madrid, **September 2016, 45 hours.**

Óscar Moreno Díaz.

- Energía Nuclear, Máster de Energía (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 18 hours.**

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

Olof Tengblad.

- Laboratory Project: Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials--Erasmus Mundus European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics (International) --Universidad Carlos III de Madrid, **February-May 2016, 10 hours.**

Santiago Sánchez Cortés.

- Raman Spectroscopy and Surface-Enhanced Raman Scattering. - School of Biophotonic – PhD – (International)-Department of Biophysics, University P. J. Safarik of Kosice, Slovak Republic, **May 2016, 4 hours.**
- Exploración de pigmentos de interés para el Patrimonio Histórico mediante espectroscopia Raman y SERS - Course “Forensic Chemistry – Pregraduated- (National) – Faculty of Sciences, Universidad Autónoma de Madrid, **November 2016, 1 hour.**

Maria Vega Cañamares Arribas.

- Chemical Sensors and Biosensors -- Máster Erasmus Mundus "Molecular nano- and bio-photonics for telecommunications and biotechnologies (Monabiphot) (International)--Universidad Complutense de Madrid, **January 2016, 2 hours.**

- SERS applications in cultural heritage and forensic science -- School of Biophotonics 2016 (PhD, International) -- P. J. Safarik University (Slovakia), **May 2016, 1.5 hours.**
- Sistemas automáticos miniaturizados, sensores y biosensores en análisis--Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas- Master – (National Official) -- Universidad Complutense de Madrid--Facultad de Ciencias Químicas, Madrid, **December 2016, 1 hour.**

Sagrario Martínez Ramírez.

- Curso Química del Cemento “Tomás Vázquez”--Curso Posgrado CSIC, International, CSIC-IECA, Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja”, Madrid, **March 2016, 5 hours.**
- Metodologías avanzadas no destructives: Análisis del Patrimonio (MetAnD), (No Official)--Curso Taller-IEM, Fundación General CSIC, Universidad Politécnica de Cataluña, **December 2016, 5 hours.**

Irene Marroquín Alonso.

- Laboratory Project: Experimental techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials – Erasmus Mundus European Master in Plasma Physics and Nuclear Fusion (International) – Universidad Carlos III de Madrid, **February-May 2016, 6 hours.**

Marina Molina Santos.

- Química (Prácticas), Grado de Óptica y Optometría (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 105 hours.**
- Química (Teoría), Grado de Óptica y Optometría (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 45 hours.**

Enrique Nácher González.

- Laboratory Project: Experimental Techniques in Plasma, Nuclear Physics and Materials--Erasmus Mundus European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics (International) --Universidad Carlos III de Madrid, **February-May 2016, 10 hours.**

Paz Sevilla Sierra.

- Física Aplicada a Farmacia (Prácticas de Laboratorio), 1º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **October 2016, 12 hours.**
- Fisicoquímica Farmacéutica (Prácticas de Laboratorio), 2º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 167 hours.**
- Fisicoquímica Farmacéutica (Teoría), 2º Grado de Farmacia (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **September 2016, 55 hours.**
- Resonancia magnética nuclear, ultrasonidos e imagen molecular, Máster Universitario en Física Biomédica, (National Official), Universidad Complutense de Madrid, **May 2016, 6 hours.**

5.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / *MACROMOLECULAR PHYSICS*

Carmen Arribas Arribas.

- Química, 1º Grado de Ingeniería Aeroespacial (National Official), ETSIAE, **September 2016, 130 hours.**
- Ciencia de los Materiales, 2º Grado de Ingeniería Aeroespacial (National Official), ETSIAE, **September 2016, 80 hours.**
- Constituents Materials and Characterization, Master in Composite Materials (National Official), ETSIAE, **October 2016, 6 hours.**

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Tutor de Prácticas Curriculares – Ingeniería de Materiales – Grado – (National) – Universidad Rey Juan Carlos, **May-August 2016, 300 hours.**

Víctor L. Cruz Cañas.

Tutor de Prácticas Curriculares – Ingeniería de Materiales – Grado – (Nacional) – Universidad Rey Juan Carlos, **May-August 2016, 300 hours.**

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Nanotecnología: luces y sombras del control de la materia a escala atómica – Curso de Postgrado – Internacional – Universidad Internacional Menéndez Pelayo, Santander, **July 2016, 2 hours.**

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Experimental testing for mechanical characterization – Programa del Máster de Ingeniería de Materiales, ETSI Caminos, Canales y Puertos, (Internacional), Universidad Politécnica de Madrid, **October 2016, 2 hours.**

Juan Francisco Vega Borrego.

- Experimentos, teorías y simulación por ordenador aplicados a la reología de poliolefinas – Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, (Internacional), Universidad Internacional Menéndez Pelayo-Consejo Superior de Investigaciones Científicas, **March 2016, 2 hours.**
- Tutor de Prácticas Curriculares – Ingeniería de Materiales – Grado, (Nacional), Universidad Rey Juan Carlos, **April-July 2016, 300 hours.**

Javier Ramos Díaz.

- Tutor de Prácticas Curriculares – Ingeniería de Materiales – Grado, (Nacional), Universidad Rey Juan Carlos, **May-August 2016, 300 hours.**

5.2 CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS / COURSES, CONFERENCES AND SEMINARS

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

José González Carmona.

- *Propiedades ópticas y electrónicas del grafeno*, 'What's up in Physics' seminar series, Instituto de Óptica, CSIC, Madrid, 23rd of June 2016.

Pedro Sarriguren Suquibide.

- *Procesos electro débiles en el núcleo atómico*, Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 17th of March 2016.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Hamiltonian formulation of parametrized field theories: incorporating boundaries and gauge symmetries*, in the series “De Madrid al Cosmos”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 18th of April 2016.
- *The quantum harmonic oscillator (I)*, Einstein on the beach 2016. II jornadas en corrientes científicas del mundo contemporáneo, Águilas (Murcia), 8th of September 2016.
- *The quantum harmonic oscillator (II)*, Einstein on the beach 2016. II jornadas en corrientes científicas del mundo contemporáneo, Águilas (Murcia), 9th of September 2016.
- *¡No sea incoherente, señor oscilador!*, Universidad Carlos III de Madrid, Seminario Junior Instituto Gregorio Millán Barbany, Madrid, 4th of November 2016.

Guillermo A. Mena Marugán.

- *Uniqueness of the Quantization of Dirac Fields with Unitary Dynamics*, Louisiana State University, Baton Rouge (USA), 11th of May 2016.
- *Uniqueness of the Fock Quantization of Dirac Fields and Quantum Coherence*, Swansea University, Swansea (UK), 14th of September 2016.
- *Loops for Dummies*, in the series “De Madrid al Cosmos”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 21st of December 2016.

Rafael A. Molina Fernández.

- *Transporte cuántico*, Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 17th of March 2016.
- *Superradiance at the localization-delocalization crossover in tubular chlorosomes*, Zuse Institut, Berlin (Germany), 11th of July 2016.
- *Zero-Mode rotating Surface states in 3D Dirac and Weyl semimetals under radiation*, Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid, 28th of September 2016.
- *Bounded states in the continuum: chiral lattices and Van Hove singularities*, Massachusetts Institute of Technology, Boston (USA), 5th of October 2016.
- *Bounded states in the continuum: chiral lattices and Van Hove singularities*, Nanyang Technological University, Singapore, 17th of November 2016.

Luis J. Garay Elizondo.

- *Hawking versus Unruh Effects, or the Difficulty of Slowly Crossing a Black Hole Horizon*, IQC, University of Waterloo, 6th of July 2016.
- *Quickly Bouncing towards a Dark and Compact End*, IQC, University of Waterloo, 13th of July 2016.

Beatriz Elizaga de Navascués.

- *Uniqueness of the Fock Quantization of Dirac Fields with Unitary Dynamics*, in the QUINFOG series, Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid, 1st of March 2016.
- *Uniqueness of the Fock Quantization of Dirac Fields with Unitary Dynamics*, Radboud University, Nijmegen (The Netherlands), 13rd of April 2016.
- *Unitary Dynamics Selecting a Quantization of the Dirac Field in Cosmology*, in the series “De Madrid al Cosmos”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 20th of June 2016.

Juan Margalef Bentabol.

- *¡Se oyen, se sienten, las ondas gravitatorias están presentes!*, Universidad Carlos III de Madrid, Seminario Junior Instituto Gregorio Millán Barbany, Madrid, 16th of March 2016.
- *Parametrized Theories: making EM even “gaugier”*, Geometry TUWien, Technical University of Vienna, 12th of April 2016.
- *Misner space as a (toy) counterexample to almost anything*, GAP seminar, Universität Wien, Vienna, 17th of May 2016.
- *Parametrized Theories: making EM even “gaugier”*, Vienna Relativity Seminar, University of Vienna, 12th of June 2016.
- *Poquito a poco me voy cuantizando*, Universidad Carlos III de Madrid, Seminario Junior Instituto Gregorio Millán Barbany, Madrid, 6th of October 2016.

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

Santiago Sánchez Cortés.

- *Plasmónica: detección molecular intensificada sobre nanoestructuras metálicas*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 16th of March 2016.
- *Exploración de pigmentos de interés para el Patrimonio Histórico mediante espectroscopia Raman y SERS*, Universidad de Tarapacá, Arica (Chile), 12th of December 2016.

José Vicente García Ramos.

- *Espectroscopia SERS sobre nanoestructuras metálicas: desarrollo de nanosensores moleculares plasmónicos*. Seminario, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid (Spain), 21st of June 2016.

Olof Tengblad.

- *Física Nuclear (1): anatomía de un experimento*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 15th of March 2016.

Carlos Cabrillo García.

- *La física de la materia desordenada*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 15th of March 2016.

José Antonio Sánchez Gil.

- *Nanofotónica y Metamateriales en el IEM*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, (Spain), 15th-17th of March 2016.
- *Single Nanoparticle Plasmon & Semiconductor Nanophotonics: Shape matters*, Center for Interdisciplinary Bioscience, Dept. of Biophysics, Faculty of Science, “P. J. Safarik of Kosice” University (Slovak Republic), 14th of April 2016.
- *Controlling light emission, scattering, and propagation at the nanoscale with metal, semiconductor and hybrid nanowires: from Plasmonics to magnetic Light*, FOM Dutch Institute of Fundamental Energy Research, DIFFER Eindhoven (The Netherlands), 17th of October 2016.
- *Controlling light emission, scattering, and propagation at the nanoscale with metal, semiconductor and hybrid nanowires*, Integrated Nanophotonics group, University of Southampton (UK), 11th of November 2016.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- *Curso Introducción a la Investigación en Estructura de la Materia* (Co-direction), IEM, Madrid, 15th-17th of March 2016.

Sagrario Martínez Ramírez.

- *Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de los materiales artificiales de construcción del Patrimonio Histórico-Artístico*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 16th of March 2016.
- *Técnicas de caracterización de materiales del patrimonio* part of the seminar “Colecciones de Referencia del patrimonio construido”, Universidad de Valparaiso, Valparaiso (Chile), 26th of October 2016.
- *Caracterización y durabilidad de morteros históricos* part of the Seminar “Estudio interdisciplinar del patrimonio construido: desde la arqueología histórica a la arqueometría”, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile (Chile), 27th of October 2016.
- *Metodologías avanzadas no destructivas (MetAnd): Analisis de Patrimonio*. Dirección del curso, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid (Spain), 13th-14th of December 2016.

Enrique Nácher González.

- *Física Nuclear (2): Aplicaciones en Física Médica y Astrofísica*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia, Madrid, 15th of March 2016.

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

- *Espectroscopia de iones moleculares: Astrofísica de laboratorio*. Part of “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.
- *Visit to the Laboratorio de espectroscopía infrarroja de alta resolución*. Part of “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.

José M. Fernández Sánchez.

- *Microchorros fluidos fuera del equilibrio*, part of the “XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.
- *Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics*. Part of “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Plasmas a baja temperatura*, part of the “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.
- *Guided visit to the Laboratorio de Plasmas Fríos*, part of the “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.

Belén Maté Naya.

- *Hielos astrofísicos*, Instituto de Estructura de la Materia, part of the “XIII Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 16th of March 2016.

María Teresa Cueto Senra.

- *Espectroscopía de muy alta resolución con dos láseres*, Ciclo de Seminarios del Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, Spain, 17th of February 2016.

5.2.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio Ezquerro Sanz.

- *Improving information density in ferroelectric polymer films by using nanostructured surfaces*, Institute of Polymer Materials, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University Riga, Latvia, 24th of May 2016.
- *Dielectric relaxation and crystallization phenomena in polymers and liquids*, Institute of Polymer Materials, Faculty of Materials Science and Applied Chemistry, Riga Technical University Riga, Latvia, 24th of May 2016

Aurora Nogales Ruiz.

- *Strategies for nanostructuring polymer surfaces*, Chemistry Department, State University of New York at Stonybrook, USA, 7th of July 2016.

Víctor L. Cruz Cañas.

- *Simulación de sistemas macromoleculares*, XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 15th-17th of March 2016.

Patricia Enrique Jiménez.

- *Propiedades nanomecánicas en polímeros*, XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 15th-17th of March 2016.
- *Estudio del bandeo en esferulitas de poli(3-hidroxitirato-co-3-hidroxitirato) mediante nanoindentación*, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), 25th of October 2016, en: "Seminario de Jóvenes Investigadores en Polímeros".

Álvaro Rodríguez Rodríguez.

- *Nanoestructuración de superficies de polímeros semiconductores por técnicas láser*, XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 15th-17th of March 2016.

Jing Cui.

- *Piezoelectric Force Microscopy of ferroelectric polymer nanoparticles embedded in polymer thin films*, XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, IEM/CSIC, Madrid, (Spain), 15th-17th of March 2016.

5.3 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

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

Jesús Fernando Barbero González.

- International Scientific Advisory Committee, Carlofest, Marseille (France), May 2016.
- Member of the Scientific Committee of the XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics, Madrid (Spain).
- Head of the Local Organizing Committee of the XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics, Madrid (Spain).
- Associate Editor of the journal *General Relativity and Gravitation*.

Eduardo Garrido Bellido.

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference *The 23rd European Conference of Few-body Problems in Physics*, Aarhus (Denmark).

Guillermo A. Mena Marugán.

- Outstanding Referee of the Year 2016 for the journals of the American Physical Society.
- Member of the Selection Committee of the Bronstein Prize in Loop quantum Gravity.
- Member of the Local Organizing Committee of the XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics, Madrid (Spain).

María Luisa Senent Diez.

- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1401 “Our Astrochemical History”.
- Member of the Management Committee of the COST ACTION 1405 “MOLIM”.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference MOLEC2016, Toledo (Spain).
- Editor of *The Journal of Physical Chemistry A*, virtual special issue “Spectroscopy and Dynamics of Medium-Sized Molecules and Clusters: Theory, Experiment, and Applications” (2016).

Gianluca Calcagni.

- Member of the Local Organizing Committee of the XXV International Fall Workshop on Geometry and Physics, Madrid (Spain).
- Reviewer of research proposals for the National Agency of Evaluation and Perspective (Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva, ANEP), Spain.

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

Juana Bellanato Fontecha.

- Member of the EUCMOS International Committee (European Conference on the Molecular Spectroscopy).

Francisco Javier Bermejo Barrera.

- Member of the Editorial Board of the *Physical Review Letters* (Divisional Associate Editor in Condensed Matter Physics).
- Member of Facility Evaluation Panel on Disordered Matter (FAP5) of the *ISIS Pulsed Neutron & Muon Source*.
- Member of the International Advisory Committee of the *International Collaboration on Advanced Neutron Sources (ICANS XXII)*.

Santiago Sánchez Cortés.

- Member of the Editorial Board of the *Vibrational Spectroscopy* journal (Elsevier).

José Antonio Sánchez Gil.

- Special Session Organizer of the 7th *International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META'16)*, Málaga (Spain): Current Advances in Electromagnetics of Metal and HRI dielectric nanostructures.
- Member of the Scientific Committee of the *Conferencia Española de Nanofotónica (CEN2016)*, Valencia (Spain).

Ricardo Fernández Perea.

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

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Dionisio Bermejo Plaza.

- Member of the International Steering Committee of the *European Conference on Non-linear Optics (ECONOS)*.
- Member of the International Advisory Committee of the *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.

Rafael Escribano Torres.

- Premio Jesús Morcillo del Comité de Espectroscopía de SEDOPTICA, Alicante, Julio 2016.

Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

- Member of the board of the *Asociación Española de Vacío y sus aplicaciones (ASEVA)* (Spain).
- Vicepresident of the board of the Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) of the *Real Sociedad Española de Física (RSEF)* (Spain).

- Spanish representative in the *Plasma Science and Technology Division of the International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)*.
- Member of the Advisory Committee of the 13th *Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015 Aveiro, Portugal 2015)*.
- Member of the Local Organizing Committee of the *XXVI International Symposium on Molecular Beams (ISMB2015, Segovia, Spain)*.
- Member of the Local Organizing Committee of the *European Conference on Laboratory Astrophysics (ECLA 2016, Madrid, Spain)*.

Salvador Montero Martín.

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

José Luis Doménech Martínez.

- Member of the Local Organizing Committee of the *European Conference on Laboratory Astrophysics (ECLA 2016, Madrid, Spain)*.

José M. Fernández Sánchez.

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

Isabel Tanarro Onrubia.

- President of the board of the “Grupo Especializado de Física de Plasmas” of the *Real Sociedad Española de Física (Spain)* since June 2016.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG)*. Period 2012-2016.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *European Conference on Laboratory Astrophysics (International, EU congress)*, Madrid (Spain), 21-25 November 2016.
- Chairperson of the Local Organizing Committee of the *European Conference on Laboratory Astrophysics (International, EU congress)*, Madrid (Spain), 21-25 November 2016.

Belén Maté Naya.

- President of the “Comité de Espectroscopia” of the *Sociedad Española de Óptica- SEDOPTICA (Spain)* until July 2016.
- Member of Scientific Committee of the “XXV Reunión Nacional de Espectroscopía- IX Congreso Ibérico de Espectroscopía” (Alicante, Spain, 20-22 July 2016).
- Member of the Local Organizing Committee of the *European Conference on Laboratory Astrophysics (ECLA 2016, Madrid, Spain)*.

Vicente Timón Salinero.

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

5.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the Proposal Review Panel: *Soft Condensed Matter: Surfaces and Interfaces* of the *German Synchrotron PETRA III* at DESY, Hamburg, Germany.
- Member of the Evaluation Panel: *Life science & soft condensed matter* of the *Spanish synchrotron ALBA*, Cerdanyola del Vallés, Barcelona, España.

Aurora Nogales Ruiz.

- Member of the Subcommittee 9 ‘Structure and Dynamics of Soft-condensed Matter’ of the *Institute Laue Langevin*.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Spanish Delegate of the *European Synchrotron Radiation Facility Council*, since September 2014.
- President of the Executive Board of the *Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE)*, since September 2013 (<http://www.ual.es/Congresos/AUSE/>).
- CSIC representative of the *SpLine-BM25 Scientific Committee* at the *European Synchrotron Radiation Facility* since June 2015.

- Member of the Facility Access Panel for the SpLine-BM25 beamline at the European Synchrotron Radiation Facility since October 2015.
- Member of Editorial Board of the journal "ISRN Nanomaterials" since March 2012.
- Senior Editor of the "Journal of Nanoscience Letters" since June 2014.
- Guest Editor of the European Polymer Journal (Elsevier) since July 2015 until May 2016.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the Scientific Committee of POLYCHAR (World Forum on Advanced Materials) since 2011.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

5.4 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH **ACTIVITIES AND MATERIAL**

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

José González Carmona.

El grafeno y sus parientes (nanotubos y fullerenos).
Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia. IEM.
Madrid.
11th of November 2016.

Jesús Fernando Barbero González.

¿Qué es la Relatividad?
Conferencia divulgativa – I.E.S. Manuel de Falla.
Coslada (Madrid).
12th of January 2016.

¿Qué es la Relatividad?
Conferencia divulgativa – I.E.S. Gustavo Adolfo Bécquer.
Algete (Madrid).
14th of March 2016.

Materiales Asombrosos.
Conferencia divulgativa – I.E.S. Gustavo Adolfo Bécquer.
Algete (Madrid).
14th of March 2016.

¿Qué es la Relatividad?
Conferencia divulgativa – I.E.S. Gómez Moreno.
Madrid.
15th of March 2016.

¿Qué es la Relatividad?
Conferencia divulgativa – I.E.S. Margarita Salas.
Majadahonda (Madrid).
16th of March 2016.

Materiales Asombrosos.
Conferencia divulgativa – I.E.S. Margarita Salas.
Majadahonda (Madrid).
16th of March 2016.

¿Qué es la Relatividad?
 Conferencia divulgativa – I.E.S. Los Rosales.
 Móstoles (Madrid).
 16th of March 2016.

¿Qué es la Relatividad?
 Conferencia divulgativa – I.E.S. Gerardo Diego.
 Pozuelo de Alarcón (Madrid).
 4th of April 2016.

Materiales Asombrosos.
 Conferencia divulgativa – I.E.S. Profesor Máximo Trueba.
 Boadilla del Monte, Madrid.
 21st of April 2016.

¿Qué es la Relatividad?
 Conferencia divulgativa – I.E.S. La Senda.
 Getafe (Madrid).
 11th of May 2016.

La física de las interacciones fundamentales.
 Conferencia divulgativa – Asociación Astronómica de Madrid.
 Madrid.
 17th of May 2016.

Explorando el Sistema Solar.
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia.
 Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
 10th of November 2016.

La física de las interacciones fundamentales.
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia.
 Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.
 16th of November 2016.

Materiales asombrosos.
 Conferencia divulgativa – I.E.S. Carmen Martín Gaité.
 Moralzarzal (Madrid).
 16th of December 2016.

Guillermo A. Mena Marugán.

Relativamente cien años.
 Charla divulgativa.
 Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Minas, UPM.
 Madrid.
 15th of February 2016.

Relatos relativistas.
 Charla divulgativa.
 I.E.S. Alagón, Coria (Cáceres).
 11st of April 2016.

Cien años y en la onda.
 Conferencia Divulgativa- Programa CiudadCiencia de la Obra Social La Caixa y el CSIC.
 Biblioteca Municipal, Coria (Cáceres).
 11st of April 2016.

Ondas gravitatorias: el cimbrar del espacio y el tiempo.
 Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia. Edificio Central del CSIC.
 Madrid.
 8th of November 2016.

LIGO Opens a New Window onto the Universe.

Conductor of Prof. David Reitze's conference in the series "Science of the Cosmos, Science in the Cosmos" – BBVA Foundation.

Madrid.

12th of December 2016.

Ondas gravitatorias.

Charla divulgativa.

Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Minas, UPM.

Madrid.

22nd of December 2016.

Luis J. Garay Elizondo.

Agujeros negros. ¿Agujeros? Negros?

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia. Edificio Central del CSIC.

Madrid.

8th of November 2016.

El tiempo en pedazos.

Conferencia divulgativa.

Facultad de Física, UCM.

Madrid.

June 2016.

Espaciotiempo, gravitación y teoría cuántica.

Serie de charlas divulgativas, 6 horas.

CMU Loyola.

Madrid.

4th-13th of April 2016.

Time in pieces.

NYU Langone Medical Center, Department of Radiology.

Center for Biomedical Imaging (CBI).

New York City, USA.

25th of March 2016.

"Interstellar" y la relatividad.

Conferencia divulgativa.

IES Satafi.

Getafe.

14th of March 2016.

Relatividad y leyes de la Física.

Conferencia divulgativa.

Facultad de Física, UCM.

Madrid.

15th of April 2016.

Juan Margalef Bentabol.

La Alhambra, Escher y 17, el número mágico.

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia.

Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid.

14th of November 2016.

La Alhambra, Escher y 17, el número mágico.

Conferencia divulgativa – Semana de la Ciencia.

Universidad Carlos III de Madrid.

15th of November 2016.

¿Sabía Escher topología?

Conferencia divulgativa – Un fisquito de matemáticas.

Universidad de la Laguna, Tenerife.

30th of November 2016.

Óscar Moreno Díaz.

La energía de las estrellas.
 Libro de divulgación.
 Colección "Un paseo por el Cosmos", RBA Contenidos Editoriales y Audiovisuales, S.A.U. (2016).
 ISBN 978-84-473-8674-1
 Depósito legal: B-20381-2016
 Traducción al italiano: "L'energie delle stelle".

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

José Vicente García Ramos.

Obra teatral "*Encuentros en la Interfase: Entre la ficción y la ciencia*".
 Grupo TeatrIEM (grupo de teatro del Instituto de Estructura de la Materia).
 Actor, Director, Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.
 - Centro Cívico Viñagrande, Alcorcón, Madrid (Spain), 30th of January 2016.
 - Residencia de Estudiantes, Madrid (Spain), 28th of February 2016.
 - Universidad de Castilla-La Mancha, Toledo (Spain), 11th of March 2016.

XIV Semana de la Ciencia.

Obra teatral "*Tu nombre me sabe a...Ciencia*" a cargo del Grupo TEatrIEM-Organiza IEM-MNCN (CSIC).
 -Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid (Spain), 18th -19th of November 2016.
 -Residencia de Investigadores del CSIC, Barcelona (Spain), 7th of December 2016.

VI Edición de INSPIRACIENCIA.

Obra teatral "*La Tortuga de Darwin*" a cargo del Grupo TEatrIEM.
 -Museo Nacional de Ciencias Naturales, Madrid (Spain), 12th of February 2016.
 -La Casa Encendida, Madrid (Spain), 24th of June 2016.

José Antonio Sánchez Gil.

Visita al *Grupo de cálculo teórico-numérico de Plasmónica-Metamateriales*.
 XIII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia - organiza IEM.
 Centro de Física "Miguel A. Catalán". Serrano 121, Madrid.
 16th of March 2016.

Sagrario Martínez Ramírez.

Programa Educativo 4º ESO+Empresa.
 Colaboración con Instituciones Educativas de la Comunidad de Madrid.
 IEM, Madrid (Spain).
 14th-17th of March 2016.

XIV Semana de la Ciencia

Taller "*Mis primeros pasos en la Investigación*", CSIC-CAM.
 -Colegio Buen Consejo, Madrid (Spain), 15th of November 2016.
 -Colegio Ave María, Madrid (Spain), 16th of November 2016.
 -Colegio Ciudad de Columbia, Tres Cantos, Madrid (Spain), 18th of November 2016.

Programa Ciudad Ciencia

Taller "*Mis primeros pasos en la investigación*", CSIC y la Obra Social La Caixa
 CEIP Virgen de la Ribera de Paracuellos del Jarama, Madrid (Spain).
 21st and 22nd of November 2016.

Diego Romero Abujetas.

Actor in "*Encuentros en la Interfase: Entre la ficción y la ciencia*"
 Scientific theater - TeatrIEM.
 Montaje y Dramaturgia: J. Vicente García-Ramos.
 -Centro Cívico Viñagrande, Alcorcón, Madrid (Spain), 30th of January 2016.
 -Residencia de Estudiantes, Madrid (Spain), 28th of February 2016.
 -Universidad de Castilla-La Mancha, Toledo (Spain), 11th of March 2016.

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Belén Maté Naya.

“La aventura del saber. Ciencia y arte”: Video: *“El invierno de Goya”*

Participation in the program “Ciencia y Arte” of the FCYT, Museo del Prado and La2 de Televisión Española.
Video Link: <http://www.rtve.es/alacarta/videos/la-aventura-del-saber/aventuracienciayartebelenmate/3655504/>
Broadcasted 14 June 2016.

5.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Actor in *“Tu nombre me sabe a... Ciencia”*.

Scientific theater - TeatrIEM

- 18-19th of November 2016. Semana de la Ciencia -Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, C/ José Abascal 9, Madrid.
- 17th of December 2016. Saló d Residència d’Investigadors CSIC-Generalitat de Catalunya, C/ Hospital 64, Barcelona.

Actor in *“Encuentros en la interfase: entre la ficción y la ciencia”*.

Scientific theater - TeatrIEM

- 30th of January. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid
- 28th of February 2016. Residencia de Estudiantes, Madrid.
- 22th of June 2016. Fundación Olivar de Castillejo-C/Menendez Pidal 3bis, Madrid

Mari Cruz García Gutiérrez.

Actress in *“Tu nombre me sabe a... Ciencia”*.

Scientific theater - TeatrIEM

- 18-19th of November 2016. Semana de la Ciencia -Museo Nacional de Ciencias Naturales, CSIC, C/ José Abascal 9, Madrid.
- 17th of December 2016. Saló d Residència d’Investigadors CSIC-Generalitat de Catalunya, C/ Hospital 64, Barcelona.

Actress in *“Encuentros en la interfase: entre la ficción y la ciencia”*.

Scientific theater - TeatrIEM

- 30th of January. Centro Cívico Viña Grande, Alcorcón, Madrid
- 28th of February 2016. Residencia de Estudiantes, Madrid.
- 22th of June 2016. Fundación Olivar de Castillejo-C/Menendez Pidal 3bis, Madrid

Araceli Flores Aguilar-Amat.

Dirección del trabajo de investigación *“Músculos artificiales de nailon”* durante la estancia de dos semanas (en abril y en julio de 2016) de los estudiantes de bachillero Alfonso Mateo Aguarón y Fernando Herce Peña, premiados en el Certamen Jóvenes Investigadores (XXVIII-Edición 2015) convocado por el Ministerio de Educación.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF TECHNOLOGY

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

Miembros de Comités Científicos Asesores.

Member: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Regulaxis SAS Company**.

Place: Technological Park in Paris (France).

Date: 2016.

Member: Santiago Sánchez Cortés.
Collaboration: **SAFTRA Photonics**.
Place: Kosice (Slovak Republic).
Date: 2016.

5.5.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Informes de transferencia tecnológica

F. Javier Ramos Díaz.

- *Report 5: Development of the connectivity-altering Monte Carlo Software.* Mitsui Chemicals, Inc. (January 2016).
- *Report 6: Development of the connectivity-altering Monte Carlo Software.* Mitsui Chemicals, Inc. (February 2016).
- *Report 7: MC_Mitsui_v01-Alpha.* Mitsui Chemicals, Inc. (August 2016).
- *Report 8: Final report of the project "Development of the connectivity-altering Monte Carlo Software".* Mitsui Chemicals, Inc. (November 2016).

5.6 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Department of Física Atómica, Molecular y Nuclear, University of Sevilla.*
 Responsable: José Miguel Arias
 Finalized on June 13th, 2016

Jesús Fernando Barbero González.

- *Group of Teorías de Campos y Física Estadística, Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany, University of Carlos III de Madrid.*
 Responsable: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.

María Luisa Senent Diez.

- *Research group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN), University of Huelva.*
 Responsable: Miguel Carvajal Zaera.

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

Santiago Sánchez Cortés.

- *Group of Spectroscopy and Molecular Structure (Departament of Physical Chemistry), University of Málaga.*
 Responsable: Juan Carlos Otero.

Otras actividades / Other activities:

Sagrario Martínez Ramírez.

- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80: Subcomité STN05/CTN-80. Cales.
- Member of the Comité Técnico de Normalización CTN80. Cementos y cales.

5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

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

5.6.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

María José Capitán Aranda.

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

Otras actividades / Other activities:

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline ID2). Grenoble, France, 4th of March-6th of March 2016.
- Measurements in the Deutsches Elektronen Synchrotron DESY, PETRA II Hamburgo, 23-26th of June 2016.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 26th of August-29th of March 2016.
- Measurements in the Spanish Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 1-3th of November 2016.

Aurora Nogales Ruíz. Short stays:

- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline ID2). Grenoble, France, 4-6th of March 2016.
- Measurements at the National Light Source II (NSLSII), (beamline CHX), Brookhaven National Lab, USA, 18-23th July, 2016.

Fernando Ania García. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (NCD beamline), Barcelona, 30th November-2nd December 2016.

Mari Cruz García Gutiérrez. Short stays:

- Participation in the Scientific Advisory Committee meeting of the Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 6-7th of June 2016.
- Participation as Spanish Delegate in the ESRF Council. Grenoble, France, 27-28th of June 2016.
- Measurements in the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), (beamline BM26). Grenoble, France, 26th of August-29th of March 2016.
- Measurements in the Spanish Synchrotron ALBA, Barcelona, Spain, 1-3th of November 2016.
- Participation as Spanish Delegate in the ESRF Council. Grenoble, France, 28-29th of November 2016.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (NCD beamline), Barcelona, 30th November-5th December 2016.

Patricia Enrique Jiménez. Short stays:

- Experiments at the synchrotron ALBA (NCD beamline), Barcelona, 30th November-5th December 2016.

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

CHAPTER 6
PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION

6.1 PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI / ISI PUBLICATIONS

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

1. A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren and E. Moya de Guerra.
Volume and surface contributions to the nuclear symmetry energy within the coherent density fluctuation model.
Physical Review C **94**, 014319 (2016).
2. M. Arzano and G. Calcagni.
What Gravity Waves are Telling about Quantum Spacetime.
Physical Review D **93**, 124065 (2016).
3. G. Balerdi, J. Woodhouse, A. Zanchet, R. Nalda, M. L. Senent, A. García Vela and L. Bañares.
Femtosecond Predissociation Dynamics of the Methyl Radical from the 3 pz Rydberg State.
Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 110 (2016).
4. L.C. Barbado, C. Barceló, L.J. Garay, and G. Jannes.
Hawking versus Unruh Effects, or the Difficulty of Slowly Crossing a Black Hole Horizon.
Journal of High Energy Physics **10**, 161 (2016).
5. L.C. Barbado, C. Barceló, L.J. Garay, and G. Jannes.
A Tensorial Description of Particle Perception in Black-Hole Physics.
Physical Review D **94**, 064004 (2016).
6. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, Eduardo J. S. Villaseñor.
Hamiltonian description of the parametrized scalar field in bounded spatial regions.
Classical and Quantum Gravity **33**, 105002 (2016).
7. J. Fernando Barbero G., Juan Margalef-Bentabol, Eduardo J. S. Villaseñor.
Hamiltonian dynamics of the parametrized electromagnetic field.
Classical and Quantum Gravity **33**, 125030 (2016).
8. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, F. Di Filippo, and L.J. Garay.
From Physical Symmetries to Emergent Gauge Symmetries.
Journal of High Energy Physics **10**, 084 (2016).
9. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Black Holes Turn White Fast, otherwise Stay Black: No Half Measures.
Journal of High Energy Physics **1601**, 157 (2016).
10. C. Barceló, R. Carballo-Rubio, and L.J. Garay.
Where Does the Physics of Extreme Gravitational Collapse Reside?
Universe **2**, 7 (2016).
11. A. Blasco, L.J. Garay, M. Martín-Benito, and E. Martín-Martínez.
Timelike Information Broadcasting in Cosmology.
Physical Review D **93**, 024055 (2016).
12. R. Boussesi, M.L. Senent and N. Jaïdane.
Weak Intramolecular Interaction Effects on the Torsional Spectra of Ethylene Glycol, an Astrophysical Species.
Journal of Chemical Physics **144**, 164110 (2016).
13. G. Calcagni, L. Modesto, and G. Nardelli.
Quantum Spectral Dimension in Quantum Field Theory.
International Journal of Modern Physics D **25**, 1650058 (2016).

14. G. Calcagni, G. Nardelli, and D. Rodríguez-Fernández.
Particle-Physics Constraints on Multifractal Spacetimes.
Physical Review D **93**, 025005 (2016).
15. G. Calcagni, G. Nardelli, and D. Rodríguez-Fernández.
Standard Model in Multiscale Theories and Observational Constraints.
Physical Review D **94**, 045018 (2016).
16. G. Calcagni.
ABC of Multi-Fractal Spacetimes and Fractional Sea Turtles.
European Physical Journal C **76**, 181 (2016).
17. G. Calcagni, S. Kuroyanagi, and S. Tsujikawa.
Cosmic Microwave Background and Inflation in Multi-Fractional Spacetimes.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics **1608**, 039 (2016).
18. J. Casal, E. Garrido, R. De Diego, J.M. Arias, and M. Rodríguez Gallardo.
Radiative capture reaction for ^{17}Ne formation within a full three-body model.
Physical Review C **94**, 054622 (2016).
19. L. Castelló Gomar, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.
Quantum Corrections to the Mukhanov-Sasaki Equations.
Physical Review D **93**, 104025 (2016).
20. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
Uniqueness of the Fock Quantization of Scalar Fields in a Bianchi I Cosmology with Unitary Dynamics.
Physical Review D **94**, 105019 (2016).
21. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, G.A. Mena Marugán, and J.M. Velhinho.
Unique Fock Quantization of a Massive Fermion Field in a Cosmological Scenario.
Physical Review D **93**, 084053 (2016).
22. S. Dalbouha, M. L. Senent, N. Komaha, and R. Domínguez-Gómez.
Structural and Spectroscopic Characterization of Methyl Isocyanate, Methyl Cyanate, Methyl Fulminate, and Acetonitrile N-oxide using Highly Correlated Ab initio Methods.
Journal of Chemical Physics **145**, 124309 (2016).
23. M. Degroote, T. M. Henderson, J. M. Zhao, J. Dukelsky, and G. Scuseria.
Polynomial similarity transformation theory: A smooth interpolation between coupled cluster doubles and projected BCS applied to the reduced BCS Hamiltonian.
Physical Review B **93**, 125124 (2016).
24. J. Dukelsky, S. Pittel, and C. Esebbag.
Structure of the number-projected BCS wave function.
Physical Review C **94**, 054622 (2016).
25. B. Elizaga Navascués, M. Martín-Benito, and G.A. Mena Marugán.
Hybrid Models in Loop Quantum Cosmology.
International Journal of Modern Physics D **25**, 1642007 (2016).
26. M. K. Gaidarov, P. Sarriguren, A. N. Antonov, D. N. Kadrev, and E. Moya de Guerra.
Structure of Exotic Mg Isotopes and Temperature Dependence of the Symmetry Energy of Finite Nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **724**, 012015 (2016).
27. L.J. Garay, E. Martín-Martínez, and J. de Ramón.
Thermalization of Particle Detectors: Unruh and Anti-Unruh Effects.
Physical Review D **94**, 104048 (2016).
28. E. Garrido, A.S. Jensen, and D.V. Fedorov.
Rotational character of the ^{12}C spectrum investigated through inelastic cross sections via photon emission.
EPJ Web of Conferences **113**, 06005 (2016).

29. E. Garrido, A. Kievsky, and M. Viviani.
Three-Body Coulomb Functions in the Hyperspherical Adiabatic Expansion Method.
Few-body Systems **57**, 1227 (2016).
30. J. González.
Confining and repulsive potentials from effective non-Abelian gauge fields in graphene bilayers.
Physical Review B **94**, 165401 (2016).
31. J. González and R.A. Molina.
Macroscopic degeneracy of zero-mode rotating surface states in 3D Dirac and Weyl semimetals under radiation.
Physical Review Letters **116**, 156803 (2016).
32. D. Hove, A.S. Jensen, H.O.U. Fynbo, N.T. Zinner, D.V. Fedorov, and E. Garrido.
Capture reactions into Borromean two-proton systems at rp waiting points.
Physical Review C **93**, 024601 (2016).
33. D. Huerga, S. Capponi, J. Dukelsky, and G. Ortiz.
Staircase of crystal phases of hard-core bosons on the kagome lattice.
Physical Review B **94**, 165124 (2016).
34. J. Margalef-Bentabol and D. Peralta-Salas.
Realization problems for limit cycles of planar polynomial vector fields.
Journal of Differential Equations **260**, 3844 (2016)
35. R.A. Molina, E. Benito-Matías, A.D. Somoza, L. Chen, and Y. Zhao.
Superradiance at the localization-delocalization crossover in tubular chlorosomes.
Physical Review E **93**, 022414 (2016).
36. L. Ortiz, R.A. Molina, G. Platero, and A.M. Lunde.
Generic helical edge states due to Rashba spin-orbit coupling in a topological insulator.
Physical Review B **93**, 205431 (2016).
37. S.M. Poullain, D.V. Chicharro, A. Zanchet, M.G. Gonzáles, L. Rubio-Largo, M. L. Senent, A. García Vela, and L. Bañares.
Imaging the Photodissociation Dynamics of the Methyl Radical from the $3s$ and $3pz$ Rydberg states.
Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 17054 (2016).
38. A. Relaño, C. Esebbag and J. Dukelsky.
Excited-state quantum phase transitions in the two-spin elliptic Gaudin model.
Physical Review E **94**, 052110 (2016).
39. P. Sarriguren.
Contribution of excited states to stellar weak-interaction rates in odd- A nuclei.
Physical Review C **93**, 054309 (2016).
40. P. Sarriguren.
Beta-decay properties of neutron-rich medium-mass nuclei.
Journal of Physics: Conference Series **724**, 012044 (2016).
41. P. Sarriguren, O. Moreno and E. Moya de Guerra.
Nuclear structure calculations for two-neutrino double-beta decay.
Advances in High Energy Physics **2016**, 6391052 (2016).
42. M.L. Senent, M. Hochlaf and M. Carvajal.
Spectroscopy and Dynamics of Medium-Sized Molecules and Clusters: Theory, Experiment, and Applications.
Journal of Physical Chemistry A **120**, 475 (2016).
43. L.A. Souza, E. Garrido, and T. Frederico.
Emergent universality in the two-neutron halo structure of ^{22}C .
Physical Review C **94**, 064002 (2016).

44. A. Zanchet, L. Bañares, M.L. Senent and A. García-Vela.
An ab initio study of the ground and excited electronic states of the methyl radical.
Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 33195 (2016).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS IN COMMON WITH ENVYMED DEPARTMENT

45. R. Reifarhl, S. Altstadt, K. Goebell, T. Heftrich, M. Heil, A. Koloczek, C. Langer, R. Plag, M. Pohl, K. Sonnabend, M. Weigand, T. Adachi, F. Aksouh, J. Al-Khalili, M. Algarawi, S. Alhamdi, G. Alkhazov, N. Alkhomashi, H. Alvarez-Pol, R. Alvarez-Rodríguez, V. Andreev, B. Andrei, L. Atar, T. Aumann, V. Adeichikov, C. Bacri, S. Bagchi, C. Barbieri, S. Beceiro, C. Beck, C. Beinrucker, G. Belier, D. Bemmerer, M. Bendel, J. Benlliure, G. Benzoni, R. Berjillos, D. Bertini, C. Bertulani, S. Bishop, N. Blasi, T. Bloch, Y. Blumenfeld, A. Bonaccorso, K. Boretzky, A. Botvina, A. Boudard, P. Boutachkov, I. Boztosun, A. Bracco, S. Brambilla, J. Briz Monago, Caamano, C. Caesar, ...P. Sarriguren..., O. Tengblad et al.
Nuclear astrophysics with radioactive ions at FAIR.
Journal of Physics Conference Series **665**, p. 012044 (2016).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FISICA MOLECULAR/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

46. R. Boussesi, S. Dalbouha, V. Timón, N. Komaha, N. Jaïdane, and M.L. Senent.
Stability of Van der Waals Complexes of the Greenhouse Effect Gases CH₄ and SF₆ with Imidazole in Gas Mixtures Containing CO₂.
Computational and Theoretical Chemistry **1094**, 82 (2016).

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

47. B. Alcaide, P. Almendros, A. M. González, A. Luna, and S. Martínez-Ramírez.
Palladium Nanoparticles in Water: A Reusable Catalytic System for the Cycloetherification or Benzannulation of α -Allenols.
Advanced Synthesis and Catalysis **358**, p. 2000 (2016).
48. F.J. Alguacil, F.A. López, O. Rodríguez, S. Martínez-Ramírez, and I. García-Díaz.
Sorption of indium (III) onto carbón nanotubes.
Ecotoxicology and Environmental Safety **130**, p. 81 (2016).
49. S. Aparicio, S. Martínez-Ramírez, M. Molero-Armenta, J.V. Fuente, and M.G. Hernández
The effect of curing relative humidity on the microstructure of self-compacting concrete.
Construction and Building Materials **104**, 154 (2016)
50. S. Aparicio, S. Martínez-Ramírez, J. Ranza, J.V. Fuente, and M.G. Hernández.
Microstructural and mechanical properties study of the curing process of self-compacting concrete.
Materials and Material&Design **94**, p. 479 (2016).
51. R. Boffy, S. Peugeot, R. Schweins, J. Beaucour, and F.J. Bermejo.
High thermal neutron flux effects on structural and macroscopic properties of alkali-borosilicate glasses used as neutron guide substrate.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms **374**, pp. 14-19 (2016).
52. B.J. M. Brenny, D.R. Abujetas, D. van Dam, J.A. Sánchez-Gil, J.G. Rivas, and A. Polman.
Directional Emission from Leaky and Guided Modes in GaAs Nanowires Measured by Cathodoluminescence.
ACS Photonics **3**, 4, pp. 677-684 (2016).
53. J.A. Briz, A. -A. Zakari-Issoufou, M. Fallot, A. Porta, A. Algora, J. L. Tain, E. Valencia, S. Rice, V. Guadilla, J. Agramunt, J. Aysto, M. Bowry, V. M. Bui, R. Caballero-Folch, D. Cano-Ott, S. Cormon, A. Cucoanes, V. Eloma, T. Eronen, E. Estevez, M. Estienne, G. F. Farrelly, L.M. Fraile, E. Ganioglu, A. García, W. Gelletly, M.B. Gómez-Hornillos, V. Gorlychev, J. Hakala, A. Jokinen, M. D. Jordan, A. Kankainen, F. G.

- Kondev, M. Lebois, T. Martínez, E. Mendoza, F. Molina, A. Montaner, I. Moore, E. Nácher, S. Orrigo, H. Penttila, A.B. Perez, Zs. Podolyak, P. H. Regan, J. Rissanen, B. Rubio, T. Shiba, A. Sonzogni, V. Vedia, C. Weber, and J. Wilson.
Total Absorption Spectroscopy of Fission Fragments Relevant for Reactor Antineutrino Spectra Determination.
Acta Physica Polonica B **47**, 3, pp. 755-762 (2016).
54. F. Cabello, S. Sánchez-Cortés and M. Jiménez de Castro.
Influence of the preparation conditions of erbium-doped bismuth - 115 -erminate glasses on its optical response.
Journal of Non-Crystalline Solids **445**, pp. 110-115 (2016).
55. C. Cabrillo, F. Barroso-Bujans, R. Fernández-Perea, F. Fernández-Alonso, D. Bowron and F. J. Bermejo.
Absorbate-induced ordering and bilayer formation in propanol-graphite-oxide intercalates
Carbon **100**, pp. 546-555 (2016).
56. J. J. Camacho, L. Díaz, A. Marin-Roldan, S. Moncayo and J. O. Caceres.
Plume Dynamics of Laser-Produced Swine Muscle Tissue Plasma.
Applied Spectroscopy **79**, 7, pp. 1228-1238 (2016).
57. P. Carmona, M. Molina and A. Toledano.
Blood-Based Biomarkers of Alzheimer's Disease: Diagnostic Algorithms and New Technologies.
Current Alzheimer Research **13**, 4, pp. 450-464 (2016).
58. I. Celikovic, M. Lewitowicz, R. Gernhaeuser, R. Krucken, S. Nishimura, H. Sakurai, D. S. Ahn, H. Baba, B. Blank, A. Blazhev, P. Boutachkov, F. Browne, G. de France, P. Doornenbal, T. Faestermann, Y. Fang, N. Fukuda, J. Giovinazzo, N. Goel, M. Gorska, S. Ilieva, N. Inabe, T. Isobe, A. Jungclaus, D. Kameda, Y. K. Kim, Y. K. Kwon, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz et.al.
New Isotopes and Proton Emitters-Crossing the Drip Line in the Vicinity of ¹⁰⁰Sn.
Physical Review Letters **116**, 16, p. 162501 (2016).
59. R. Chapman, Z.M. Wang, M. Bouhelal, F. Haas, X. Liang, F. Azaiez, B.R. 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, S. Lunardi, N. Marginean, G. Montagnoli, D.R. Napoli, F. Nowacki, J. Ollier, D. O'Donnell, ... et al.
First in-beam gamma-ray study of the level structure of neutron-rich ³⁹S.
Physical Review C **94**, 2, p. 024325 (2016).
60. R. Chapman, Z. M. Wang, M. Bouhelal, F. Haas, X. Liang, F. Azaiez, B. R. 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, S. Lunardi et.al.
Particle-core coupling in ³⁷S.
Physical Review C **93**, 4, p. 044318 (2016).
61. D. Ciofini, M. Oujja, M. V. Vega Canamares, S. Siano and M. Castillejo.
Spectroscopic assessment of the UV laser removal of varnishes from painted surfaces.
Microchemical Journal **124**, pp. 792-803 (2016).
62. M. P. de Lara-Castells, R. Fernández-Perea, F. Madzharova and E. Voloshina.
Post-Hartree-Fock studies of the He/Mg(0001) interaction: Anti-corrugation, screening, and pairwise additivity.
Journal of Chemical Physics **144**, 24, p. 244707 (2016).
63. A. Doménech-Carbó, M. A. Villegas, F. Agua, S. Martínez-Ramírez, M. T. Doménech-Carbó, B. Martínez.
Electrochemical fingerprint of archaeological lead silicate glasses using the voltammetry of microparticles approach.
Journal of the American Ceramic Society **99**, p. 3915 (2016).
64. R. Dunlop, V. Bildstein, I. Dillmann, A. Jungclaus, C. E. Svensson, C. Andreoiu, G. C. Ball, N. Bernier, H. Bidaman, P. Boubel, C. Burbadge, R. Caballero-Folch, M. R. Dunlop, L. J. Evitts, F. García, A. B. Garnsworthy, P. E. Garrett, G. Hackman et.al.
Half-lives of neutron-rich ¹²⁸⁻¹³⁰Cd.
Physical Review C **93**, 6, p. 062801 (2016).

65. A. L. Filgueiras, F. R. A. Lima, D. F. de Carvalho, M. A. Meirelles, D. Paschoal, H. F. dos Santos, S. Sánchez-Cortés and A. C. Sant'Ana.
The Adsorption of Rifampicin on Gold or Silver Surfaces Mediated by 2-Mercaptoethanol Investigated by Surface-enhanced Raman Scattering Spectroscopy.
Vibrational Spectroscopy **86**, pp. 75-80 (2016).
66. M. Frías, O. Rodríguez, R. Vigil de la Villa, R. García, S. Martínez-Ramírez, L.J. Fernández-Carrasco, and I. Vegas.
The Influence of Activated Coal Mining Wastes on the Mineralogy of Blended Cement Pastes.
Journal of the American Ceramic Society **99**, 300 (2016)
67. L. N. Furini, C. J. L. Constantino, S. Sánchez-Cortés, J. C. Otero and I. López-Tocon.
Adsorption of carbendazim pesticide on plasmonic nanoparticles studied by surface-enhanced Raman scattering.
Journal of Colloid and Interface Science **465**, pp. 183-189 (2016).
68. M.J. García Borge
Highlights of the ISOLDE facility and the HIE-ISOLDE Project.
Acta Physica Polonica B, **47**, 591 (2016)
69. M.J. García Borge
Highlights of the ISOLDE facility and the HIE-ISOLDE Project.
EPJ Web of Conferences **117**, 10002 (2016)
70. M.J. García Borge
Highlights of the ISOLDE facility and the HIE-ISOLDE Project.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B **376**, 408, (2016)
71. M.J. García Borge and K. Riisage
HIE-ISOLDE, the Project and the physics opportunities.
European Physical Journal A **52**, 334 (2016)
72. A. García-Leis, D. Jancura, M. Antalík, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés and Z. Jurasekova.
Catalytic Effects of Silver Plasmonic Nanoparticles on the Redox Reaction Leading to ABTS (center dot+) Formation Studied Using UV-visible and Raman Spectroscopy.
Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 38, pp. 26562-26571(2016).
73. V. Guadilla, A. Algora, J. L. Tain, J. Agramunt, J. Aysto, J. A. Briz, D. Cano-Ott, A. Cucoanes, T. Eronen, M. Estienne, M. Fallot, L. M. Fraile, E. Ganioglu, W. Gelletly, D. Gorelov, J. Hakala, A. Jokinen, D. Jordan, A. Kankainen, V. Kolhinen, J. Koponen, M. Lebois, T. Martínez, M. Monserrate, A. Montaner-Piza, I. Moore, E. Nácher, S. Orrigo, H. Penttila, Zs. Podolyak, I. Pohjalainen, A. Porta, P. Regan, J. Reinikainen, M. Reponen, S. Rinta-Antila, B. Rubio, K. Rytkonen, T. Shiba, V. Sonnenschein, A. A. Sonzogni, E. Valencia, V. Vedia, A. Voss, J. N. Wilson and A. –A Zakari-Issoufou.
First experiment with the NUSTAR/FAIR Decay Total Absorption gamma-Ray Spectrometer (DTAS) at the IGISOL IV facility.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B **376**, pp. 334-337 (2016).
74. K. Hadynka-Klek, P.J. Napiorkowski, M. Zielinska, J. Srebrny, A. Maj, F. Azaiez, J.J. Valiente Dobón, M. Kicinska-Habior, F. Nowacki, H. Naïdja, B. Bounthong, T.R. Rodríguez, G. de Angelis, T. Abraham, G. Anil Kumar, D. Bazzacco, M. Bellato, D. Bortolato, P. Bednarczyk, G. Benzoni, L. Berti, B. Birkenbach, B. Bruyneel, S. Brambilla, F. Camera, J. Chavas, B. Cederwall, L. Charles, M. Ciemała, P. Cocconi, P. Coleman-Smith, A. Colombo, A. Corsi, F.C.L. Crespi, D.M. Cullen, A. Czermak, P. Désesquelles, D.T. Doherty, B. Dulny, J. Eberth, E. Farnea, B. Fornal, S. Franchoo, A. Gadea, A. Giaz, A. Gottardo, X. Grave, J. Grebosz, A. Görgen, M. Gulmini, T. Habermann, H. Hess, R. Isocrate, J. Iwanicki, G. Jaworski, D.S. Judson, A. Jungclaus, N. Karkour, M. Kmiecik, D. Karpinski, M. Kisielinski, et al.
Superdeformed and Triaxial States in ⁴²Ca.
Physical Review Letters **117**, 6, p. 062501 (2016).
75. M. Hernandez, E. Corda, J. V. García-Ramos, C. Domingo and P. Sevilla.
SERS of the anti-inflammatory drug piroxicam adsorbed on the surface of silver or gold colloids as nanocarrier model.
Journal of Raman Spectroscopy **47**, 4, pp. 402-407 (2016).

76. B. Hernandez, E. López-Tobar, S. Sánchez-Cortés, Y. M. Coic, B. Baron, A. Chenal, S. G. Kruglik, F. Pfluger, R. Cohen and M. Ghomi.
From bulk to plasmonic nanoparticle surfaces: the behavior of two potent therapeutic peptides, octreotide and pasireotide.
Physical Chemistry Chemical Physics **18**, 35, pp. 24437-24450 (2016).
77. N. Husillos-Rodríguez, S. Martínez-Ramírez, M. T. Blanco-Varela.
Activated carbon as an alternative fuel. Effect of carbon ash on cement clinkerization.
Journal of Cleaner Production **119**, p. 50 (2016).
78. E. Ideguchi, G.S. Simpson, R. Yokoyama, M. Tanaka, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, P.A. Soderstrom, T. Sumikama, J. Wu, Z.Y. Xu, N. Aoi, H. Baba, F.L.B. Garrote, F.L. Bello, G. Benzoni, F. Browne, R. Daido, Y. Fang, N. Fukuda, A. Gottardo, G. Gey, S. Go, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, K. Kobayashi, M. Kobayashi, I. Kojouharov, T. Komatsubara, T. Kubo, N. Kurz, I. Kuti, Z. Li, M. Matsushita, S. Michimasa, C.B.
mu s isomers of Nd-158, Nd-160.
Physical Review C **94**, 064322 (2016)
79. A. Jungclaus.
Single particle versus collectivity, shapes of exotic nuclei.
European Physical Journal Plus **131**, 3, p. 59 (2016).
80. A. Jungclaus, A. Gargano, H. Grawe, J. Taprogge, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, Y. Shimizu, G. S. Simpson, P. -A. Soederstroem, T. Sumikama, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai et.al.
First observation of γ rays emitted from excited states south-east of ^{132}Sn : The $\pi g_{9/2}^{-1} \otimes \nu f_{7/2}$ multiplet of $^{132}\text{In}_{83}$.
Physical Review C **93**, 4, p. 041301 (2016).
81. A. Jungclaus, H. Grawe, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G. S. Simpson, P.-A Soederstroem, T. Sumikama, J. Taprogge, Z. Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhaeuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H. S. Jung, D. Kameda, G. D. Kim, Y. -K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y. K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, K. Steiger, H. Suzuki et.al.
 β decay of semi-magic ^{130}Cd : Revision and extension of the level scheme of ^{130}In .
Physical Review C **94**, 2, p. 024303 (2016).
82. M. Krzysiek, M. Kmiecik, A. Maj, P. Bednarczyk, A. Bracco, F. C. L. Crespi, E. G. Lanza, E. Litvinova, N. Paar, R. Avigo, D. Bazzacco, G. Benzoni, B. Birkenbach, N. Blasi, S. Bottoni, S. Brambilla, F. Camera, S. Ceruti, M. Ciemala, G. de Angelis, P. Desesquelles, J. Eberth, E. Farnea, A. Gadea, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, J. Grebosz, H. Hess, R. Isocarte, A. Jungclaus, S. Leoni, J. Ljungvall, S. Lunardi et.al.
Pygmy dipole resonance in ^{140}Ce via inelastic scattering of ^{17}O .
Physical Review C **93**, 4, p. 044330 (2016).
83. R. Lica, H. Mach, L. M. Fraile, A. Gargano, M. J. G. Borge, N. Marginean, C. O. Sotty, V. Vedia, A. N. Andreyev, G. Benzoni, P. Bomans, R. Borcea, L. Coraggio, C. Costache, H. De Witte, F. Flavigny, H. Fynbo, L. P. Gaffney, P. T. Greenlees, L. J. Harkness-Brennan, M. Huyse, P. Ibanez, D. S. Judson, J. Konki, A. Korgul, T. Kroell, J. Kurcewicz, S. Lalkovski, I. Lazarus, M. V. Lund, M. Madurga, R. Marginean, I. Marroquin, C. Mihai, R. E. Mihai, A. I. Morales, E. Nácher, A. Negret, R. D. Page, J. Pakarinen, S. Pascu, V. Pazyi, A. Perea, M. Perez-Liva, E. Picado, V. Pucknell, E. Rapisarda, P. Rakhila, F. Rotaru, J. A. Swartz, O. Tengblad, P. Van Duppen, M. Vidal, R. Wadsworth, W. B. Walters and N. Warr.
Fast-timing study of the l -forbidden $1/2(+) \rightarrow 3/2(+) M1$ transition in Sn-129 .
Physical Review C **93**, 4, 044303 (2016).
84. E. López-Tobar, V. Verebova, L. Blascakova, D. Jancura and G. Fabriciova, S. Sánchez-Cortés.
Detection and aggregation of the antitumoral drug parietin in ethanol/water mixture and on plasmonic metal nanoparticles studied by surface-enhanced optical spectroscopy: Effect of pH and ethanol concentration.
Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular **159**, pp. 134-140 (2016).
85. M. V. Lund, A. Andreyev, M. J. G. Borge, J. Cederkall, H. De Witte, L. M. Fraile, H. O.U. Fynbo, P. T. Greenlees, L. J. Harkness-Brennan, A. M. Howard, M. Huyse, B. Jonson, D. S. Judson, O. S. Kirsebom, J. Konki, J. Kurcewicz, I. Lazarus, R. Lica, S. Lindberg, M. Madurga, N. Marginean, R. Marginean, I. Marroquin, C. Mihai, M. Munch, E. Nácher, A. Negret, T. Nilsson, R. D. Page, S. Pascu, A. Perea, V.

- Pucknell, P. Rakhila, E. Rapisarda, K. Riisager, F. Rotaru, C. Sotty, M. Stanoiu, O. Tengblad, A. Turturica, P. Van Duppen, V. Vedia, R. Wadsworth, and N. Warr.
Beta-delayed proton emission from Mg-20.
European Physical Journal A. 52, 10, p. 304 (2016).
86. H. Mach, A. Lindroth, E. Ruchowska, J. Kvasil, B. Fogelberg, K. Gulda, A. J. Aas, M. J. G. Borge, I. S. Grant, E. Hagebo, W. Kurcewicz, T. Martínez, B. Rubio, J. F. Smith, K. Steffensen, J. L. Tain, O. Tengblad, T. F. Thorsteinsen.
On the enhanced E1 transitions in the K=3/2 parity doublet band in Ra-223.
European Physical Journal A 52, 6, p. 172 (2016).
87. J. Marganec, S. Beceiro Novo, S. Typel, C. Langer, C. Wimmer, H. Álvarez-Pol, T. Aumann, K. Boretzky, E. Casarejos, A. Chatillon, D. Cortina-Gil, U. Datta-Pramanik, Z. Elekes, Z. Fulop, D. Galaviz, H. Geissel, S. Giron, U. Greife, F. Hammache, J. Hoffman, H. Johansson, O. Kiselev, N. Kurz, K. Larsson, T. Le Bleis, A. Litvinov, K. Mahata, C. Muentz, C. Nociforo, W. Ott, S. Paschalis, R. Plag, W. Prokopowicz, C.R. Rodríguez Tajés, D.M. Rossi, H. Simon, M. Stanoiu, J. Stroth, K. Summerer, A. Wagner, F. Wamers, H. Weick, and M. Wiescher
Coulomb dissociation of P-27 at 500 MeV/u.
Physical Review C 93, 045811 (2016)
88. J. Marganec, F. Wamers, F. Aksouh, Y. Aksyutina, H. Alvarez Pol, T. Aumann, S. Beceiro, C. Bertulani, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, I. Egorova, H. Emling, O. Ershova, C. Forssen, L. M. Fraile, H. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, L. Grigorenko, M. Heil, D. H. H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. Johansson, B. Jonson, M. Karakoc, C. Karagiannis, O. Kiselev, J. V. Kratz, R. Kulessa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, K. Larsson, T. Le Bleis, R. Lemmon, Yu A. Litvinov, K. Mahata, C. Muentz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, Yu Parfenova, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarth, A. Richter, K. Riisager, C. Rodríguez Tajés, D. Rossi, G. Schrieder, N. Shulgina, H. Simon, J. Stroth, K. Suemmerer, J. Taylor, O. Tengblad, E. Tengborn, H. Weick, M. Wiescher, C. Wimmer, M. Zhukov.
Experimental study of the O-15(2p, gamma) Ne-17 cross section by Coulomb Dissociation for the rp process.
Journal of Physics Conference Series 665, p. 012046 (2016).
89. J. Marganec, F. Wamers, F. Aksouh, Yu. Aksyutina, H. Alvarez-Pol, T. Aumann, S. Beceiro-Novo, C. A. Bertulani, K. Boretzky, M. J. G. Borge, M. Chartier, A. Chatillon, L. V. Chulkov, D. Cortina-Gil, H. Emling, O. Ershova, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, M. Heil, D. H. H. Hoffmann, J. Hoffmann, H. T. Johansson, B. Jonson, C. Karagiannis, O. A. Kiselev, J. V. Kratz, R. Kulessa, N. Kurz, C. Langer, M. Lantz, T. Le Bleis, R. Lemmon, Yu. A. Litvinov, K. Mahata, C. Muentz, T. Nilsson, C. Nociforo, G. Nyman, W. Ott, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, R. Plag, R. Reifarth, A. Richter, C. Rodríguez-Tajés, D. Rossi, K. Riisager, D. Savran, G. Schrieder, H. Simon, J. Stroth, K. Suemmerer, O. Tengblad, S. Typel, H. Weick, M. Wiescher and C. Wimmer.
Coulomb and nuclear excitations of narrow resonances in Ne-17.
Physics Letters B 759, pp. 200-205 (2016).
90. G. Marquín-Durán, I. Martel, A. M. Sánchez-Benítez, L. Acosta, R. Berjillos, J. Duenas, K. Rusek, N. Keeley, M. A. G. Álvarez, M. J. G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J. P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J. L. Flores, J. Gómez-Camacho, K. W. Kemper, J. A. Labrador, M. Marqués, A. M. Moro, M. Mazzocco, A. Pakou, V. V. Parkar, N. Patronis, V. Pesudo, D. Pierroutsakou, R. Raabe, R. Silvestri, N. Soic, L. Standylo, I. Strojek, O. Tengblad, R. Wolski and Z. Abou-Haidar.
Precise measurement of near-barrier He-8+Pb-208 elastic scattering: Comparison with He-6.
Physical Review C 94, 6, p. 064618 (2016).
91. G. Marquín-Durán, A. M. Sánchez-Benítez, I. Martel, L. Acosta, K. Rusek, M. A. G. Álvarez, R. Berjillos, M. J. G. Borge, A. Chbihi, C. Cruz, M. Cubero, J. A. Duenas, J. P. Fernández-García, B. Fernández-Martínez, J. L. Flores, J. Gómez-Camacho, N. Keeley, J. A. Labrador, M. Marqués, A. M. Moro, M. Mazzocco, A. Pakou, V. V. Parkar, N. Patronis, V. Pesudo, D. Pierroutsakou, R. Raabe, R. Silvestri, N. Soic, L. Standylo, I. Strojek, O. Tengblad, R. Wolski, A. H. Ziad.
Study of the Near-barrier Scattering of He-8 on Pb-208.
Acta Physica Polonica B 47, 3, pp. 841-846 (2016).
92. I. Marroquín, M. J. G. Borge, A. A. Ciemny, H. de Witte, L. M. Fraile, H. O. U. Fynbo, A. Garzón-Camacho, A. Howard, H. Johansson, B. Jonson, O. S. Kirsebom, G. T. Koldste, R. Lica, M. V. Lund, M. Madurga, C. Mazzocchi, C. Mihai, M. Munch, S. A. Nae, E. Nácher, A. Negret, T. Nilsson, A. Perea, J. Refsgaard, K. Riisager, E. Rapisarda, C. Sotty, M. Stanoiu, O. Tengblad, A. E. Turturica and M. V. Vedia.

- Multi-particle Emission from ar-31 at ISOLDE.
Acta Physica Polonica B **47**, 3, pp. 747-754 (2016).
93. S. Martínez-Ramírez, R. Gutiérrez-Contreras, N. Husillos-Rodríguez, L. Fernández-Carrasco.
In-situ reaction of the very early hydration of C₃A-gypsum-sucrose system by Micro-Raman spectroscopy.
Cement and Concrete Composites **73**, p. 251 (2016).
 94. D. Montanari, L. Corradi, S. Szilner, G. Pollarolo, A. Goasduff, T. Mijatovic, D. Bazzacco, B. Birkenbach, A. Bracco, L. Charles, S. Courtin, P. Desesquelles, E. Fioretto, A. Gadea, A. Gorgen, A. Gottardo, J. Grebosz, F. Haas, H. Hess, D. J. Malenica, D. Jelavic, A. Jungclaus, M. Karolak, S. Leoni, A. Maj, R. Menegazzo, D. Mengoni, C. Michelagnoli et.al.
Pair neutron transfer in ⁶⁰Ni + ¹¹⁶Sn probed via γ -particle coincidences.
Physical Review C **93**, 5, p. 054623 (2016).
 95. A.I. Morales, G. Benzoni, H. Watanabe, S. Nishimura, F. Browne, R. Daido, P. Doornenbal, Y. Fang, G. Lorusso, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, P. A. Soederstroem, T. Sumikama, J. Wu, Z.Y. Xu, A. Yagi, R. Yokoyama, H. Baba, R. Avigo, F.L.B. Garrote, N. Blasi, A. Bracco, F. Camera, S. Ceruti, F.C.L. Crespi, G. de Angelis, M.C. Delattre, Z. Dombradi, A. Gottardo, T. Isobe, I. Kojouharov, N. Kurz, I. Kuti, K. Matsui, B. Melon, D. Mengoni, T. Miyazaki, V. Modamio-Hoyborg, S. Momiyama, D.R. Napoli, M. Niikura, R. Orlandi, H. Sakurai, E. Sahin, D. Sohler, H. Shaffner, R. Taniuchi, J. Taprogge, Z. Vajta, J.J. Valiente-Dobon, O. Wieland, and M. Yalcinkaya
Low-lying excitations in Ni-72.
Physical Review C **93**, 034328 (2016)
 96. H.M. Moreno, B. Herranz, M. Pérez-Mateos, I. Sánchez-Alonso, A.J. Borderías
New Alternatives in Seafood Restructured Products.
Critical Reviews in Food Science and Nutrition **56**, 237 (2016)
 97. E. Nácher, B. Rubio, A. Algora, D. Cano-Ott, J. L. Tain, A. Gadea, J. Agramunt, M. Gierlik, M. Karny, Z. Janas, E. Roeckl, A. Blazhev, R. Collatz, J. Doering, M. Hellstroem, Z. Hu, R. Kirchner, I. Mukha, C. Plettner, M. Shibata, K. Rykaczewski, L. Batist, F. Moroz, V. Wittmann, J. J. Valiente-Dobon.
Observations of the Gamow-Teller resonance in the rare-earth nuclei above Gd-146 populated in beta decay.
Physical Review C **93**, 1, p. 014308 (2016).
 98. K. Nowak, K. Wimmer, S. Hellgartner, D. Muecher, V. Bildstein, J. Diriken, J. Elseviers, L.P. Gaffney, R. Gernhaeuser, J. Iwanicki, J.G. Johansen, M. Huyse, J. Konki, T. Kroell, R. Kruecken, R. Lutter, R. Orlandi, J. Pakarinen, R. Raabe, P. Reiter, T. Roger, G. Schrieder, G. Seidlitz, O. Sorlin, P. Duppen, N. Warr, H. de Witte, and M. Zielinska
Spectroscopy of Ar-46 by the (t, p) two-neutron transfer reaction.
Physical Review C **93**, 044335 (2016)
 99. B. Olaizola, H. Mach, L. M. Fraile, J. Benito, M. J. G. Borge, R. Boutami, P. A. Butler, Z. Dlouhy, H. O. U.Fynbo, P. Hoff, S. Hyldegaard, H. B. Jeppesen, A. Jokinen, C. Jollet, A. Korgul, U. Koster, Th. Kroell, W. Kurcewicz, F. Marechal, J. Mrazek, T. Nilsson, W. A. Plociennik, E. Ruchowska, R. Schuber, W. Schwerdtfeger, M. Sewtz, G. S. Simpson, M. Stanoiu, O. Tengblad, P. G. Thirolf and D. T. Yordanov.
High-sensitivity study of levels in Al-30 following beta decay of Mg-30.
Physical Review C **94**, 5, p. 054318 (2016).
 100. D. G. de Oliveira, L. P. F. Peixoto, S. Sánchez-Cortés and G. F. S. Andrade.
Chitosan-based improved stability of gold nanoparticles for the study of adsorption of dyes using SERS.
Vibrational Spectroscopy **87**, pp. 8-13 (2016).
 101. T. Palomar, M. Oujja, I. Llorente, B. R. Barat, M. V. Canamares, E. Cano, and M. Castillejo.
Evaluation of laser cleaning for the restoration of tarnished silver artifacts.
Applied Surface Science **387**, pp. 118-127 (2016).
 102. Z. Patel, Zs. Podolyák, P. M. Walker, P. H. Regan, P.-A. Söderström, H. Watanabe, E. Ideguchi, G. S. Simpson, S. Nishimura, F. Browne, P. Doornenbal, G. Lorusso, S. Rice, L. Sinclair, T. Sumikama, J. Wu, Z. Y. Xu, N. Aoi, H. Baba, F. L. Bello Garrote, G. Benzoni, R. Daido, Zs. Dombrádi, Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, S. Go, A. Gottardo, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, K. Kobayashi, M. Kobayashi, T. Komatsubara, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, I. Kuti, Z. Li, H. L. Liu, M. Matsushita, S. Michimasa, C.-B. Moon, H. Nishizuka, I. Nishizuka, A. Odahara, E. Şahin, H. Sakurai, H. Schaffner, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, Zs. Vajta, F. R. Xu, A. Yagi and R. Yokoyama.

- Decay spectroscopy of ^{160}Sm : The lightest four-quasiparticle K isomer.
Physics Letters B, V. 753, p. 182–186 (2016)
103. Z. Patel, Z. Podolyak, P.M. Walker, P.H. Regan, P.A. Soderstrom, H. Watanabe, E. Ideguchi, G.S. Simpson, S. Nishimura, F. Browne, P. Doornenbal, G. Lorusso, S. Rice, L. Sinclair, T. Sumikama, J. Wu, Z.Y. Xu, N. Aoi, H. Baba, F.L.B. Garrote, G. Benzoni, R. Daido, Z. Dombradi, Zs. Y. Fang, N. Fukuda, G. Gey, S. Go, A. Gottardo, N. Inabe, T. Isobe, D. Kameda, M. Kobayashi, T. Komatsubara, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, I. Kuti, Z. Li, H.L. Liu, M. Matsushita, S. Michimasa, C.B. Moon, H. Nishibata, I. Nishizuka, A. Odahara, E. Sahin, H. Sakurai, H. Schaffner, H. Suzuki, H. Takeda, M. Tanaka, J. Taprogge, Z. Vajta, F.R. Xu, A. Yagi, and R. Yokoyama.
Beta-decay spectroscopy of neutron-rich Sm-160, Sm-161, Sm-162 isotopes.
EPJ Web of Conferences **123**, 02002 (2016)
104. B. Pietras, M. Winkel, H. Alvarez-Pol, M. Bendel, E. Casarejos, J. Cederkall, D. Cortina-Gil, G. Fernández, R. Gernhaeuser, P. Golubev, D. Gonzalez, A. Hartig, P. Izquierdo, P. Klenze, T. Le Bleis, E. Nácher, A. Perea, P. Remmels, G. Ribeiro, P. Teubig, J. Vilan and P. Yanez.
First testing of the CALIFA Barrel Demonstrator.
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research A **814**, pp. 56-65 (2016).
105. T. Pintado, A. M. Herrero, C. Ruiz-Capillas, M. Triki, P. Carmona and F. Jiménez-Colmenero.
Effects of emulsion gels containing bioactive compounds on sensorial, technological, and structural properties of frankfurters.
Food Science and Technology International **22**, 2, pp. 132-145 (2016).
106. Zs. Podolyák, C. M. Shand, N. Lalovic, J. Gerl, D. Rudolph, T. Alexander, P. Boutachkov, M. L. Cortés, M. Gorska, I. Kojouharov, N. Kurz, C. Louchart, E. Merchan, C. Michelagnoli, R. M. Perez-Vidal, S. Pietri, D. Ralet, M. Reese, H. Schaffner, Ch. Stahl, H. Weick, F. Ameil, G. de Angelis, T. Arici, R. Carroll, Zs. Dombradi, A. Gadea, P. Golubev, M. Lettmann, C. Lizarazo, D. Mahboub, H. Pai, Z. Patel, N. Pietralla, P. H. Regan, L. G. Sarmiento, O. Wieland, E. Wilson, B. Birkenbach, B. Bruyneel, I. Burrows, L. Charles, E. Clement, F. C. L. Crespi, D. M. Cullen, P. Desesquelles, J. Eberth, V. Gonzalez, T. Habermann, L. Harkness-Brennan, H. Hess, D. S. Judson, A. Jungclaus, W. Korten, M. Labiche, A. Maj, D. Mengoni, D. R. Napoli, A. Pullia, B. Quintana, G. Rainovski, P. Reiter, M. D. Salsac, E. Sanchis and J. J. Valiente Dobon.
Role of the resonance in the population of a four-nucleon state in the $^{56}\text{Fe} \rightarrow ^{54}\text{Fe}$ reaction at relativistic energies.
Physical Review Letters **117**, 22, p. 222302 (2016).
107. Pragati, A.Y. Deo, Z. Podolyak, P.M. Walker, A. Algora, B. Rubio, J. Agramunt, L.M. Fraile, N. Al-Dahan, N. Alkhomashi, J.A. Briz, M.E. Estevez Aguado, G. Farrelly, W. Gelletly, A. Herlert, U. Koster, and A. Maira
Decay of the $N=126$, Fr-213 nucleus.
Physical Review C **94**, 064316 (2016)
108. D. Puerto, M. García-Lechuga, J. Hernandez-Rueda, A. García-Leis, S. Sánchez-Cortés, J. Solis and J. Siegel.
Femtosecond laser-controlled self-assembly of amorphous-crystalline nanogratings in silicon.
Nanotechnology **27**, 26, p. 265602 (2016).
109. F. Renzi, R. Raabe, G. Randisi, D. Smirnov, C. Angulo, J. Cabrera, E. Casarejos, Th. Keutgen, A. Ninane, J. L. Charvet, A. Gillibert, V. Lapoux, L. Nalpas, A. Obertelli, F. Skaza, J. L. Sida, N. A. Orr, S. I. Sidorchuk, R. Wolski, M. J. G. Borge, D. Escrig.
Spectroscopy of He-7 using the Be-9(He-6, Be-8) transfer reaction.
Physical Review C **94**, 2, p. 024619 (2016).
110. M. Roder, T. Adachi, Y. Aksyutina, J. Alcantara, S. Altstadt, H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, L. Atar, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Barr, S. Beceiro, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. Bertulani, K. Boretzky, M. J. G. Borge, G. Burgunder, M. Caamano, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, S. Chakraborty, M. Chartier, L. Chulkov, D. Cortina-Gil, R. Crespo, U. D. Pramanik, P. Díaz-Fernández, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estrade, F. Farinon, L. M. Fraile, M. Freer, M. Freudenberger, H. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhaeuser, K. Goebel, P. Golubev, D. G. Díaz, J. Hagdahl, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Heinz, A. Henriques, M. Holl, G. Ickert, A. Ignatov, B. Jakobsson, H. Johansson, B. N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, A. Kelic-Heil, R. Knoebel, T. Kroell, R. Kruecken, J. Kurcewicz, N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, O. Lepyoshkina, S. Lindberg, J. Machado, J. Marganec, M. Mostazo Caro, A. Movsesyan, M. A. Najafi, T. Nilsson, C. Nociforo, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, M.

- Petri, S. Pietri, R. Plag, A. Prochazka, M. A. Rahaman, G. Rastrepina, R. Reifarth, G. Ribeiro, M. V. Ricciardi, C. Rigollet, K. Riisager, D. Rossi, J. S. D. del Rio Saez, D. Savran, H. Scheit, H. Simon, O. Sorlin, V. Stoica, B. Streicher, J. Taylor, O. Tengblad et. al.
Coulomb dissociation of N-20, N-21.
Physical Review C **93**, 6, p. 065807 (2016).
111. I. F. Sáez Del Bosque, M. Martín-Pastor, I. Sobrados, S. Martínez Ramírez, M. T. Blanco-Varela.
Quantitative analysis of pure triclinic tricalcium silicate and C-S-H gels by ^{29}Si NMR longitudinal relaxation time.
Construction and Building Materials **107**, p. 52 (2016).
112. E. Sahin, F.L. Bello Garrote, A. Gorgen, G. de Angelis, M. Niikura, S. Nishimura, D. Mengoni, Z. Xu, H. Baba, F. Browne, P. Doornenbal, S. Franchoo, G. Guillaume, T. Isobe, P.R. John, H.S. Jung, K.K. Hadynska-Klek, Z. Li, G. Lorusso, I. Matea, K. Matsui, P. Morfouace, D.R. Napoli, H. Nishibata, A. Odahara, H. Sakurai, P.A. Soderstrom, D. Sohler, I. Stefan, T. Sumikama, D. Suzuki, R. Taniuchi, J. Taprogge, Z. Vajta, H. Watanabe, V. Werner, J. Wu, A. Yagi, and K. Yoshinaga
First results on the excited states in Cu-77.
Acta Physica Polonica B **47**, 889 (2016)
113. P. A. Soderstrom, P. Doornenbal, G. Lorusso, S. Nishimura, J. Wu, Z. Y. Xu, H. Baba, G. Benzoni, F. Browne, G. Gey, T. Isobe, A. Jungclaus, G. Kiss, I. Kojouharov, N. Kurz, D. Lubos, K. Moschner, Z. Patel, V. H. Phong, S. Rice, H. Sakurai, H. Schaffner, G. S. Simpson, L. Sinclair, T. Sumikama, J. Taprogge, Zs. Vajta, H. Watanabe, A. Yagi.
Status and results from the decay spectroscopy project EURICA (Euroball-RIKEN Cluster Array).
AIP Conference Proceedings **1753**, p. 070001 (2016).
114. J. Taprogge, A. Jungclaus, H. Grawe, I.N. Borzov, S. Nishimura, P. Doornenbal, G. Lorusso, G.S. Simpson, P.-A. Söderstöm, T. Sumikama, Z.Y. Xu, H. Baba, F. Browne, N. Fukuda, R. Gernhäuser, G. Gey, N. Inabe, T. Isobe, H.S. Jung, D. Kameda, G.D. Kim, Y.-K. Kim, I. Kojouharov, T. Kubo, N. Kurz, Y.K. Kwon, Z. Li, H. Sakurai, H. Schaffner, Y. Shimizu, K. Steiger, H. Suzuki, H. Takeda, Zs. Vajta, H. Watanabe, J. Wu, A. Yagi, K. Yoshinaga, G. Benzoni, S. Bönig, K.Y. Chae, L. Coraggio, J.-M. Daugas, F. Drouet, A. Gadea, A. Gargano, S. Ilieva, N. Itaco, F.G. Kondev, T. Kröll, G.J. Lane, A. Montaner-Piza, K. Moschner, D. Mücher, F. Naqvi, M. Niikura, H. Nishibata, A. Odahara, R. Orlandi, Z. Patel, Zs. Podolyak, and A. Wendt.
Proton-hole and core-excited states in the semi-magic nucleus $^{131}\text{In}_{82}$.
European Physical Journal A **52**, 11, p. 347 (2016).
115. R. Thies, A. Heinz, T. Adachi, Y. Aksyutina, J. Alcantara-Nunes, S. Altstadt, H. Alvarez-Pol, N. Ashwood, T. Aumann, V. Avdeichikov, M. Barr, S. Beceiro-Novo, D. Bemmerer, J. Benlliure, C. A. Bertulani, K. Boretzky, M. J. G. Borge, G. Burgunder, M. Camano, C. Caesar, E. Casarejos, W. Catford, J. Cederkall, S. Chakraborty, M. Chartier, L. V. Chulkov, D. Cortina-Gil, R. Crespo, U. Datta, P. Díaz Fernández, I. Dillmann, Z. Elekes, J. Enders, O. Ershova, A. Estrade, F. Farinon, L. M. Fraile, M. Freer, M. Freudenberger, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, H. Geissel, R. Gernhäuser, K. Gobel, P. Golubev, D. G. Díaz, T. Heftrich, M. Heil, M. Heine, A. Henriques, M. Holl, G. Ickert, A. Ignatov, B. Jakobsson, H. T. Johansson, B. Jonson, N. Kalantar-Nayestanaki, R. Kanungo, R. Knobel, T. Kroll, R. Krucken, J. Kurcewicz, N. Kurz, M. Labiche, C. Langer, T. Le Bleis, R. Lemmon, O. Lepyoshkina, S. Lindberg, J. Machado, J. Marganec, V. Maroussov, M. Mostazo, A. Movsesyan, A. Najafi, T. Nilsson, C. Nociforo, V. Panin, S. Paschalis, A. Perea, M. Petri, S. Pietri, R. Plag, A. Prochazka, A. Rahaman, G. Rastrepina, R. Reifarth, G. Ribeiro, M. V. Ricciardi, O. Tengblad et al.
Systematic investigation of projectile fragmentation using beams of unstable B and C isotopes.
Physical Review C **93**, 5, p. 054601 (2016).
116. D. van Dam, D. R. Abujetas, J. A. Sánchez-Gil, J. E. M. Haverkort, Erik P. A. M. Bakkers and J. G. Rivas.
Strong diameter-dependence of nanowire emission coupled to waveguide modes.
Applied Physics Letters **108**, 12, p. 121109 (2016).
117. A. Vogt, B. Birkenbach, P. Reiter, A. Blazhev, M. Siciliano, J. J. Valiente-Dobon, C. Wheldon, D. Bazzacco, M. Bowry, A. Bracco, B. Bruyneel, R. S. Chakrawarthy, R. Chapman, D. Cline, L. Corradi, F. C. L. Crespi, M. Cromaz, G. de Angelis, J. Eberth, P. Fallon, E. Farnea, E. Fioretto, S. J. Freeman, A. Gadea, K. Geibel, W. Gelletly, A. Gengelbach, A. Giaz, A. Gorgen, A. Gottardo, A. B. Hayes, H. Hess, H. Hua, P. R. John, J. Jolie, A. Jungclaus, W. Korten, I. Y. Lee, S. Leoni et.al.
High-spin structure of ^{134}Xe .
Physical Review C **93**, 5, p. 054325 (2016).

118. J. Wu, S. Nishimura, G. Lorusso, Z.Y. Xu, E. Ideguchi, G.S. Simpson, H. Baba, F. Browne, R. Daido, P. Doornebal, Y.F. Fang, T. Isobe, Z. Li, Z. Patel, S. Rice, L. Sinclair, P.A. Soederstroem, T. Sumikama, H. Watanabe, A. Yagi, R. Yokoyama, N. Aoi, F.L.B. Garrote, G. Benzoni, G. Gey, A. Gottardo, H. Nishibata, A. Odahara, H. Sakurai, M. Tanaka, J. Taprogge, and T. Yamamoto.
Beta-decay half-lives of neutron-rich nuclei around Nd-158, relevant to the formation of the A approximate to 165 rare-earth element peak.
EPJ Web of Conferences **109**, 08003 (2016)

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE OFT / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE OFT DEPARTMENT

- R. Reifarhl, S. Altstadt, K. Goebell, T. Heftrich, M. Heil, A. Koloczek, C. Langer, R. Plag, M. Pohl, K. Sonnabend, M. Weigand, T. Adachi, F. Aksouh, J. Al-Khalili, M. Algarawi, S. Alhamdi, G. Alkhazov, N. Alkhomashi, H. Alvarez-Pol, R. Alvarez-Rodríguez, V. Andreev, B. Andrei, L. Atar, T. Aumann, V. Adeichikov, C. Bacri, S. Bagchi, C. Barbieri, S. Beceiro, C. Beck, C. Beinrucker, G. Belier, D. Bemmerer, M. Bendel, J. Benlliure, G. Benzoni, R. Berjillos, D. Bertini, C. Bertulani, S. Bishop, N. Blasi, T. Bloch, Y. Blumenfeld, A. Bonaccorso, K. Boretzky, A. Botvina, A. Boudard, P. Boutachkov, I. Boztosun, A. Bracco, S. Brambilla, J. Briz Monago, Caamano, C. Caesar,P. Sarriguren..., O. Tengblad et al.
Nuclear astrophysics with radioactive ions at FAIR.
Journal of Physics Conference Series **665**, p. 012044 (2016).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

119. A. Alkadrou, M. Rotger, D. Bermejo, J. L. Doménech and V. Boudon.
High-resolution stimulated Raman spectroscopy and analysis of line positions and assignments for the ν_2 and ν_3 bands of $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$.
Journal of Raman Spectroscopy, 47(7), 839-844 (2016)
120. L. J. Bonales, F. Colmenero, J. Cobos and V. Timón.
Spectroscopic Raman characterization of rutherfordine: a combined DFT and experimental study.
Physical Chemistry Chemical Physics, 18(24), 16575-16584 (2016)
121. J. L. Doménech, B. J. Drouin, J. Cernicharo, V. J. Herrero and I. Tanarro.
The high resolution infrared spectrum of HCl^+
Astrophysical Journal Letters. 833:L32 (2016)
122. Óscar Gálvez, M. Teresa Baeza-Romero, Mikel Sanz and Luis F. Pacios.
A theoretical study on the reaction of ozone with aqueous iodide.
Physical Chemistry Chemical Physics, 18, 7651-7660, (2016)
123. O. Galvez, M.T. Baeza-Romero, Mikel Sanz and A. Saiz-López.
Photolysis of frozen iodate salts as a source of active iodine in the polar environment.
Atmospheric Chemistry and Physics, 16, 12703-12713 (2016)
124. B.M. Giuliano, R. Martín-Doménech, R.M. Escribano, J. Manzano-Santamaría and G.M. Muñoz Caro.
Interstellar ice analogs: H_2O ice mixtures with CH_3OH and NH_3 in the far-IR region.
Astronomy and Astrophysics, 592, A81 (2016).
125. A. Kouchi, T. Hama, Y. Kimura, H. Hidaka, R. Escribano and N. Watanabe.
Matrix sublimation method for the formation of high-density amorphous ice.
Chemical Physics Letters 658, 287-292 (2016).
126. B. Maté, G. Molpeceres, M. Jiménez-Redondo, I. Tanarro and V. J. Herrero.
High-energy electron irradiation of interstellar carbonaceous dust analogs: cosmic ray effects on the carriers of the $3.4 \mu\text{m}$ absorption band.
The Astrophysical Journal 831, 51 (2016)
127. G. Molpeceres, V. M. Rayón, C. Barrientos, and A. Largo.
Molecular structure and bonding in plutonium carbides: a theoretical study of PuC_3
Journal of Physical Chemistry A, 120(14), 2232-2239 (2016).

128. G. Molpeceres, M.A. Satorre, J. Ortigoso, C. Millán, R. Escribano and B. Maté.
Optical constants and band strengths of CH₄:C₂H₆ ices in the near- and mid-infrared.
Astrophysical Journal, 825:156 (2016).
129. R. Morea, A. Miguel, T. T. Fernández, B. Maté, F. J. Ferrer, C. Maffiotte, J. Fernández, R. Balda and J. Gonzalo.
Er³⁺-doped fluorotellurite thin film glasses with improved photoluminescence emission at 1.53 μm.
Journal of Luminescence, 170, 778-784 (2016).
130. V. Sáez Rábanos, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz and V. J. Herrero.
Influence of vibration in the reactive scattering of D+MuH: the effect of dynamical bonding.
Physical Chemistry Chemical Physics 18, 13530 (2016)
131. Angel G. Valdenebro.
Visualizing rotations and composition of rotations with the Rodrigues vector.
European Journal of Physics, 37(6), 065001 (2016)
132. F. Weiss, F. Kubel, Ó. Gálvez, M. Hoelzel, S. F. Parker, R. Iannarelli, M. Rossi, T. Peter and H. Grothe.
Metastable Nitric Acid Trihydrate in Ice Clouds.
Angewandte Chemie International Edition, 55, 3276–3280 (2016)

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QFT / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE QFT DEPARTMENT

- R. Boussessi, S. Dalbouha, V. Timón, N. Komih, N. Jaïdane, M.L. Senent.
Stability of Van der Waals complexes of the greenhouse effect gases CH₄ and SF₆ with imidazole in gas mixtures containing CO₂.
Computational and Theoretical Chemistry, 1904, 82–91 (2016)

6.1.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

133. K.M. Abushab, J.L. Herraiz, E Vicente, J. Cal-González, S. Espana, J.J. Vaquero, B.W. Jakoby, and J.M. Udias.
Evaluation of PeneloPET Simulations of Biograph PET/CT Scanners
IEEE Transactions on Nuclear Science **63**, 1367 (2016).
134. B. Cámara, V. Souza-Egipsy, C. Ascaso, O. Artieda, A. De Los Ríos, and J. Wierzchos.
Biosignatures and microbial fossils in endolithic microbial communities colonizing Ca-sulfate crusts in the Atacama Desert.
Chemical Geology **443**, 22 (2016)
135. M.J. Capitán, Álvarez, J. Álvarez, C. Navio, and R. Miranda.
Cu diffusion as an alternative method for nanopatterned CuTCNQ film growth.
Journal of Physics-Condensed Matter **28**, 185002 (2016)
136. A. Concellón, E. Blasco, A. Martínez-Felipe, J.C. Martínez, I. Sics, T.A. Ezquerra, A. Nogales, M. Piñol, and L. Oriol.
Light-Responsive Self-Assembled Materials By Supramolecular Post-Functionalization Via Hydrogen Bonding Of Amphiphilic Block Copolymers.
Macromolecules **49**, 7825 (2016)
137. J. Cui, D.A. Martínez-Tong, A. Sanz, T.A. Ezquerra, E. Rebollar, and A. Nogales.
Relaxation and Conductivity in P3HT/PC71BM Blends as Revealed by Dielectric Spectroscopy.
Macromolecules **49**, 2709 (2016)
138. J. Cui, A. Rodríguez-Rodríguez, M. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M. Castillejo, D. Moseguí-González, P. Müller-Buschbaum, T.A. Ezquerra, and E. Rebollar.
Laser induced periodic surface structures of P3HT and of its photovoltaic blend with PC71BM.
ACS Applied Materials & Interfaces **8**, 31894 (2016)

139. A. del Campo, A. Nogales, T.A. Ezquerro, and J. Rodríguez-Hernández.
Modification of poly(dimethylsiloxane) as a basis for surface wrinkle formation: chemical and mechanical characterization.
Polymer **98** 327 (2016)
140. N. Dencheva, Z. Denchev, S. Lanceros, and T.A. Ezquerro
One-Step In Situ Synthesis of Polyamide Microcapsules With Inorganic Payload and Their Transformation into Responsive Thermoplastic Composite Materials.
Macromolecular Materials and Engineering **301**,119 (2016)
141. P. Enrique-Jiménez, J. F. Vega, J. Martínez-Salazar, F. Ania, and Araceli Flores
Mapping the mechanical properties of poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) banded spherulites by nanoindentation.
Polymers **8**, 358 (2016)
142. T.A. Ezquerro, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, and A. Muller
Introduction to the special issue on "Applications of synchrotron radiation in polymers science".
European Polymer Journal **81**, 413 (2016)
143. A. Flores, F. Ania, H.J. Salavagione, G. Ellis, D. Saurel, and M.A. Gómez-Fatou
Local mechanical properties of graphene/polyethylene-based nanocomposites by depth-sensing indentation.
European Polymer Journal **74**, 120 (2016)
144. H. García-Juan, A. Nogales, E. Blasco, J.C. Martínez, I. Šics, T.A. Ezquerro, M. Piñol, and L. Oriol.
Self-assembly of thermo and light responsive amphiphilic linear dendritic block copolymers.
European Polymer Journal **81**, 621 (2016)
145. A. Hellati, A. Douibi, S. Boufassa, R. Benavente, D. Benachour, and F. J. Balta Calleja.
The role of the compatibilizer on the microindentation hardness of iPP/PC blends.
Polymer Engineering and Science **56**, 1138, (2016)
146. M. Lahcini, S. Elhakioui, D. Szopinski, B. Neuer, A. El Kadib, F. Scheliga, M. Raihane, F.J. Baltá Calleja, and G.A. Luinstra.
Harnessing synergies in tin-clay catalyst for the preparation of poly(epsilon-caprolactone)/halloysite nanocomposites.
European Polymer Journal **81**, 11 (2016)
147. L. Latreche, N. Haddaoui, and M.E. Cagliaio.
The effect of various compatibilizers on thermal, mechanical, and morphological properties of polystyrene/polypropylene blends.
Russian Journal Applied Chemistry **89**, 1713 (2016)
148. J. Martín, A. Scaccabarozzi, A. Nogales, L. Ruipeng, D-M Smilgies, and N. Stingelin.
Confinement Effects on the Crystalline Features of Poly(9,9-dioctylfluorene).
European Polymer Journal **81**, 650 (2016)
149. M. Mompeán, A. Nogales, T.A. Ezquerro, and D. Laurents.
Complex System Assembly Underlies a Two-Tiered Model of Highly Delocalized Electrons.
The Journal of Physical Chemistry Letters **7**, 1859 (2016)
150. A. Nogales and A. Fluerasu.
X Ray Photon Correlation Spectroscopy for the Study of Polymer Dynamics (Feature Article).
European Polymer Journal **81**, 494 (2016)
151. E. Rebollar, D.E. Martínez-Tong, M. Sanz, M. Oujja, J.F. Marco, T.A. Ezquerro, and M. Castillejo.
Fluence dependent electrical conductivity in aluminium thin films grown by infrared pulsed laser deposition.
Applied Surface Science **387**, 1188 (2016)
152. H.J. Salavagione, S. Quiles-Díaz, P. Enrique-Jiménez, G. Martínez, F. Ania, A. Flores, and M.A. Gómez-Fatou.
Development of advanced elastomeric conductive nanocomposites by selective chemical affinity of modified graphene.
Macromolecules **49**, 4948 (2016)

153. J. Ramos and V.L. Cruz.
Conformational analysis of short polar side-chain amino-acids through umbrella sampling and DFT calculations.
Journal of Molecular Modeling **22**, 273 (2016)
154. J. Ramos, J.F. Vega, S. Sanmartín, and J. Martínez-Salazar.
Coarse-grained simulations on the crystallization, melting and annealing processes of short chain branched polyolefins.
European Polymer Journal **85**, 478 (2016)
155. J. Ramos, J.F. Vega, and J. Martínez-Salazar.
A new insight into the conformation and melt dynamics of hydrogenated polybutadiene as revealed by computer simulations.
Soft matter **12**, 3929 (2016)
156. E. Rubio-Portillo, F. Santos, M. Martínez-García, A. de los Ríos, C. Ascaso, V. Souza-Egipsy, A.A. Ramos-Esplá, and J. Anton.
*Structure and temporal dynamics of the bacterial communities associated to microhabitats of the coral *Oculina patagonica**
Environmental Microbiology **18**, 4564 (2016)
157. V. Sánchez-Gil, E.G. Noya, A. Sanz, S.J. Kathib, J.M. Guil, E. Lomba, R. Marguta, and S. Valencia.
Experimental and Simulation Studies of the Toluene on Pure-Silica MEL Zeolite.
Journal of Physical Chemistry C **120**, 8640 (2016)
158. J.F. Vega, A.J. Müller, and J. Martínez-Salazar.
New habits in branched polyethylene single crystals.
European Polymer Journal **80**, 169 (2016)
159. J.F. Vega, E. Vicente-Alique, R. Núñez-Ramírez, Y. Wang, and J. Martínez-Salazar.
Evidences of changes in surface electrostatic charge distribution during stabilization of HPV16 Virus-Like Particles
PloS one **11**, e0149009 (2016)

6.2 PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. A. N. Antonov, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra.
Volume and Surface Components of the Nuclear Symmetry Energy.
Proceedings of the 35th International Workshop on Nuclear Theory **35**, 72 (2016).

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

2. M.J. García Borge and Y. Kadi.
ISOLDE at CERN
Nuclear Physics News **26**, 6 (2016)
3. M. Frías, R. García, R. Vigil De La Villa, and S. Martínez-Ramírez.
Coal Mining Waste as a Future Eco-Efficient Supplementary Cementing Material: Scientific Aspects.
Journal of Recycling **1**, 232 (2016)

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

6.3.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

1. Tiberio Ezquerro, Mari Cruz García-Gutiérrez, Aurora Nogales, A. Müller (Editors).
Special Section: Application of Synchrotron Radiation in Polymer Science.
European Polymer Journal, Volume 81, Pages 1-694 (2016)

6.4 TESIS DOCTORALES / PH.D. THESES

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

Title: Perturbaciones primordiales en Cosmología Cuántica de Lazos

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Date: 24th of June 2016

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Laura Castelló Gomar

Supervisor: Guillermo Antonio Mena Marugán

Title: Study of Prebiotic Molecules of Astrophysical Interest: Isotopologues of Ethylene Glycol and Dimethyl Carbonate (Ab Initio Study)

University: Faculté de Sciences de Tunis, Université de Tunis el Manar

Date: 16th of December 2016

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Rahma Boussessi

Supervisors: Nejm-Eddine Jaïdane and María Luisa Senent Diez

Title: Gravity as an Emergent Phenomenon: Fundamentals and Applications

University: Facultad de Ciencias, Universidad de Granada

Date: 24th of June 2016

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Raúl Carballo Rubio

Supervisors: Carlos Barceló Serón and Luis J. Garay Elizondo

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

Title: Design of a new neutron delivery system for high flux source

University: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid

Date: 5th of February 2016

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Romain Boffy

Supervisor: Francisco Javier Bermejo Barrera and José Manuel Perlado Martín

Title: Caracterización de fármacos (emodina, ketorolaco, indometacina y Piroxicam) sobre nanopartículas metálicas mediante espectroscopía molecular (SERS y MEF)

University: Facultad de Farmacia, Universidad Complutense de Madrid

Date: 17th of June 2016

Mark: Sobresaliente "cum laude"

Candidate: Margarita Hernández González

Supervisor: Paz Sevilla Sierra

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Title: **Espectroscopía de muy alta resolución con dos láseres**

University: Universidad Pablo de Olavide, Facultad de Ciencias Experimentales, Sevilla

Date: 21st of January 2016

Mark: Sobresaliente “cum Laude” por unanimidad

Candidate: **Teresa Cueto Senra**

Supervisor: **José Luis Doménech Martínez y Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga**

Title: **Diagnostics and modeling of cold plasmas with high hydrogen content**

University: Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Física

Date: 15th of November 2016

Mark: Sobresaliente cum Laude por unanimidad

Candidate: **Miguel Jiménez Redondo**

Supervisor: **Isabel Tanarro Onrubia**

6.4.4 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Title: **Nanoestructuración y propiedades de superficies de polímeros con aplicaciones en energía**

Type: **Tesis doctoral**

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 21th of November 2016.

Mark: Sobresaliente Cum Laude

Candidate: **Jing Cui**

Supervisor: **Aurora Nogales Ruiz y Esther Rebollar González**

6.5 TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES / MASTER, GRADE AND OTHER DEGREES THESES

6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: **Campos cuánticos en espacio-tiempos curvos**

Type: Trabajo fin de Grado

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid

Date: June 2016

Candidate: José de Ramón

Supervisor: **Luis J. Garay Elizondo**

Title: **Non-local Theories and Scale Holography**

Type: Trabajo fin de Máster

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid

Date: June 2016

Candidate: Salvador E.R. Ciarreta

Supervisor: **Luis J. Garay Elizondo**

Title: **Detección directa de partículas de materia oscura mediante dispersión elástica con núcleos**

Type: Trabajo fin de Máster

University: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid

Date: September 2016

Candidate: Miguel Molero González

Supervisor: **Elvira Moya Valgañón and Óscar Moreno Díaz**

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

Title: **Caracterización vibracional de pigmentos históricos sintéticos de interés para el patrimonio cultural mediante técnicas espectroscópicas ópticas basadas en efectos plasmónicos no destructivos**

Type: Trabajo fin de Máster

University: Universidad de Oviedo

Date: July 2016

Candidate: Alba Espina García

Supervisor: **Santiago Sánchez Cortés and Adianez García Leis**

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

CHAPTER 7
TABLES AND DATA

7.1 INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN / PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2012	2013	2014	2015	2016
Number of ISI publications	182	179	187	155	159
Number of non-ISI publications	12	13	18	16	4
Total stock of PhD fellowships and contracts	18	22	22	18	16
Number of PhD Theses defended	8	5	8	7	8
“Créditos” in PhD, MSc and BSc Courses	57,4*	82,4*	32,9*	88*	89

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI / SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	NUMBER OF PAPERS	IMPACT FACTOR (JCR -2015)
Angewandte Chemie International Edition	1	11.709
Journal of Physical Chemistry Letters	1	8.539
Physical Review Letters	4	7.645
ACS Applied Materials and Interfaces	1	7.145
Advanced Synthesis and Catalysis	1	6.453
Carbon	1	6.198
Journal of High Energy Physics	3	6.023
Environmental Microbiology	1	5.932
Astrophysical Journal	2	5.909
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	1	5.634
Macromolecules	3	5.554
Critical Reviews in Food Science and Nutrition	1	5.492
Astrophysical Journal Letters	1	5.487
ACS Photonics	1	5.404
Astronomy and Astrophysics	1	5.185
Atmospheric Chemistry and Physics	1	5.114
Journal of Cleaner Production	1	4.959
European Physical Journal C	1	4.912
Physics Letters, Section B	2	4.787
Journal of Physical Chemistry C	1	4.509
Physical Review D - Particles, Fields, Gravitation and Cosmology	9	4.506
Physical Chemistry Chemical Physics	8	4.449
Materials & Design	1	3.997
Soft Matter	1	3.798
Journal of Colloid and Interface Science	1	3.782
Physical Review B	4	3.718
Polymer	1	3.586
Nanotechnology	1	3.573
European Polymer Journal	8	3.485

Chemical Geology	1	3.482
Cement and Concrete Composites	1	3.399
Applied Surface Science	2	3.150
Physical Review C - Nuclear Physics	26	3.146
Current Alzheimer research	1	3.145
Applied Physics Letters	1	3.142
Ecotoxicology and Environmental Safety	1	3.130
PLoS ONE	1	3.057
Polymers	1	2.944
Journal of Chemical Physics	3	2.894
Microchemical Journal	1	2.893
Journal of physical chemistry, A	2	2.883
Classical and Quantum Gravity	2	2.837
Macromolecular Materials and Engineering	1	2.834
Journal of the American Ceramic Society	2	2.787
Journal of Luminescence	1	2.693
Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy	1	2.653
Construction and Building Materials	2	2.421
Journal of Raman Spectroscopy	2	2.395
European Physical Journal A	4	2.373
Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics	2	2.252
Journal of Physics-Condensed Matter	1	2.209
International Journal of Modern Physics D	2	1.963
Chemical Physics Letters	1	1.860
Advances in High Energy Physics	1	1.839
Journal of Non-Crystalline Solids	1	1.825
Journal of Differential Equations	1	1.821
Applied Spectroscopy	1	1.798
Polymer Engineering and Science	1	1.719
Vibrational Spectroscopy	2	1.682
European Physical Journal Plus	1	1.521
Journal of Molecular Modeling	1	1.438
Computational and Theoretical Chemistry	1	1.403
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B	3	1.389
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1	1.200
IEEE Transactions on Nuclear Science	1	1.198
Food Science and Technology International	1	0.991
Acta Physica Polonica, Series B	5	0.795
European Journal of Physics	1	0.608
Few-Body Systems	1	0.558
Russian Journal of Applied Chemistry	1	0.307
TOTAL:	149	Average Impact Factor: 3,48

Number of Journals: 70

7.3 EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS

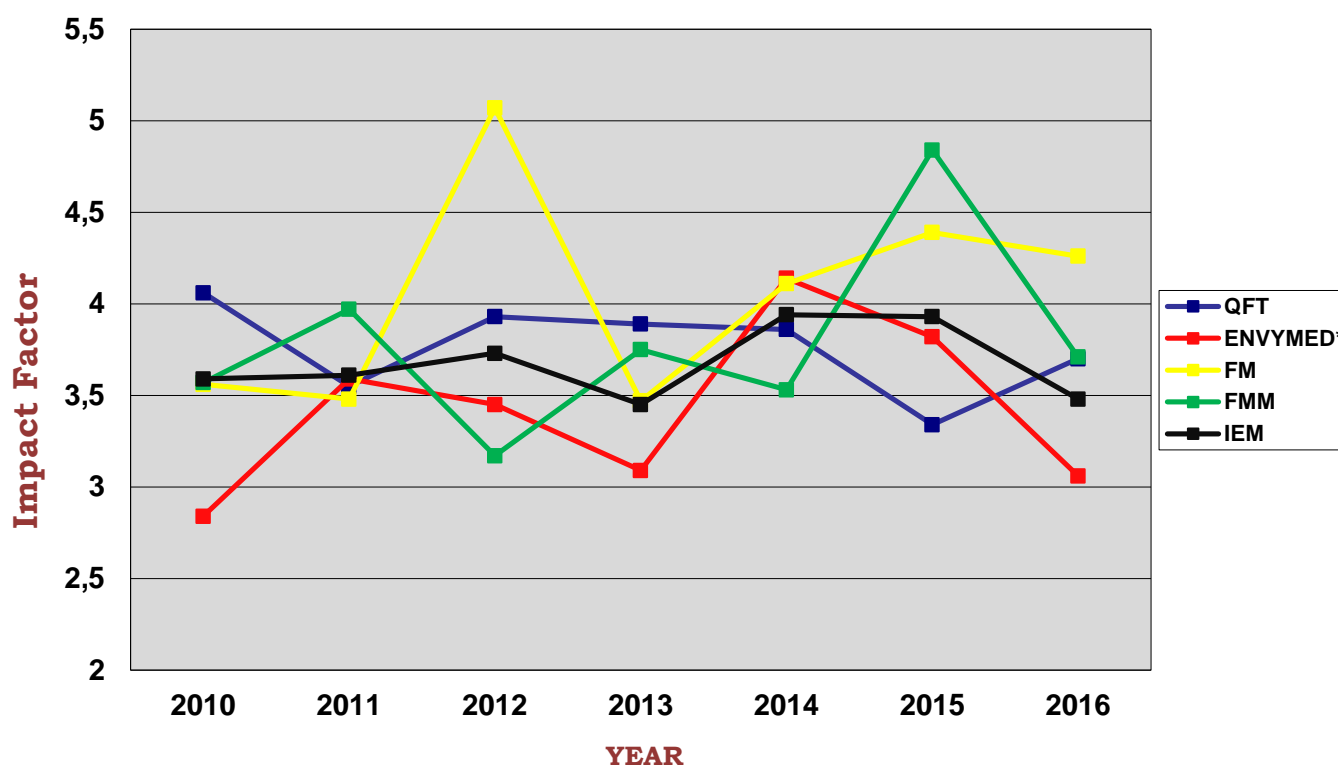
Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (QFT)

Molecular Physics (FM)

Macromolecular Physics (FMM)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (ENVYMED)



* El Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados (ENVYMED) fue creado en febrero del 2011, por lo que los datos comparativos del año 2010 han sido tomados de los antiguos departamentos que lo componían: el de Física Nuclear y Física Estadística y el de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos/
The ENVYMED Department was created in February of 2011. The comparative data for the year 2010 have been taken from those of the former departments from which it was formed: The Nuclear Physics and Statistical Physics Dept. and the Vibrational Spectroscopy and Multiphotonic Processes Dept.

7.4 PERSONAL POR DEPARTAMENTOS / PERSONNEL BY DEPARTMENTS

DPTO.	Scientific Staff		"Ramón & Cajal"		Adjoint Researchers		Rest of the Scientific Personnel ¹		Support Staff		Total		
	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	M	F	TOTAL
QFT	7	1	1	-	1	2	-	2	-	-	9	5	14
ENVYMED	9	3	-	-	-	2	4	1	2	1	15	7	22
FM	10	2	1	-	1	-	2	-	2		16	2	18
FMM	5	5	1	-	1	1	3	4	2	2	12	12	24
ADMON.	-	-	-	-	-	-	-	-	3	9	3	9	12
IEM	31	11	3	-	3	5	9	7	9	12	55	35	90

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: 82

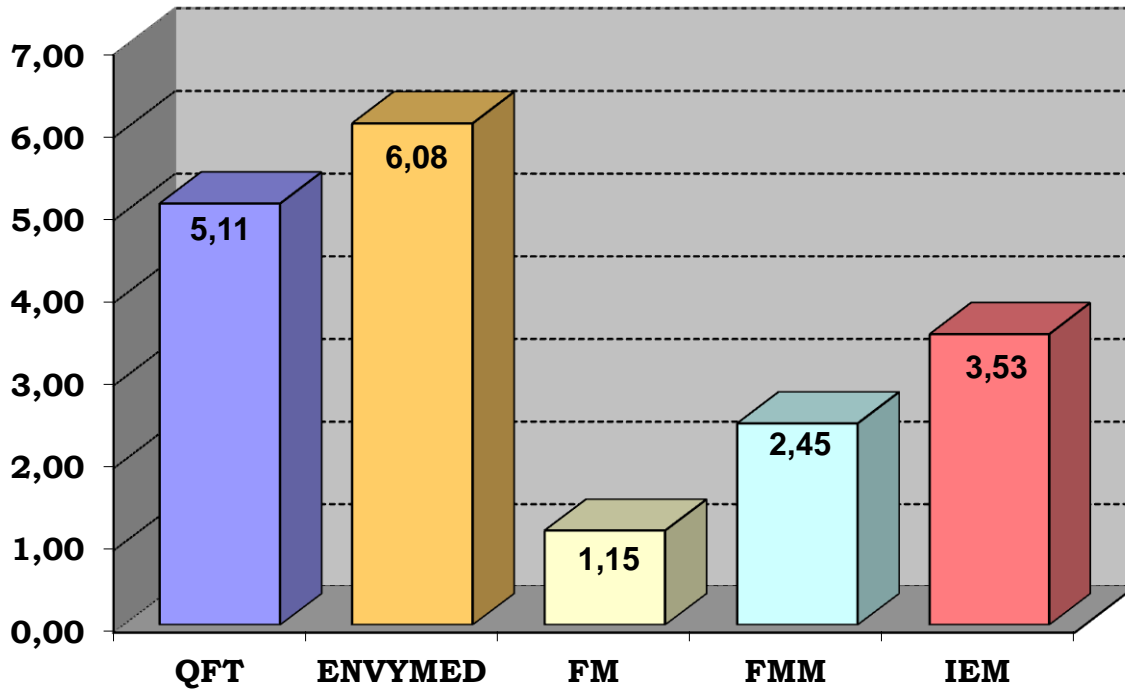
7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS / NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS

	QFT	ENVYMED	FM	FMM	IEM
ISI publications	44(+2) ¹	72(+1) ¹	14(+1) ¹	27	159
Other publications	1	2		1	4

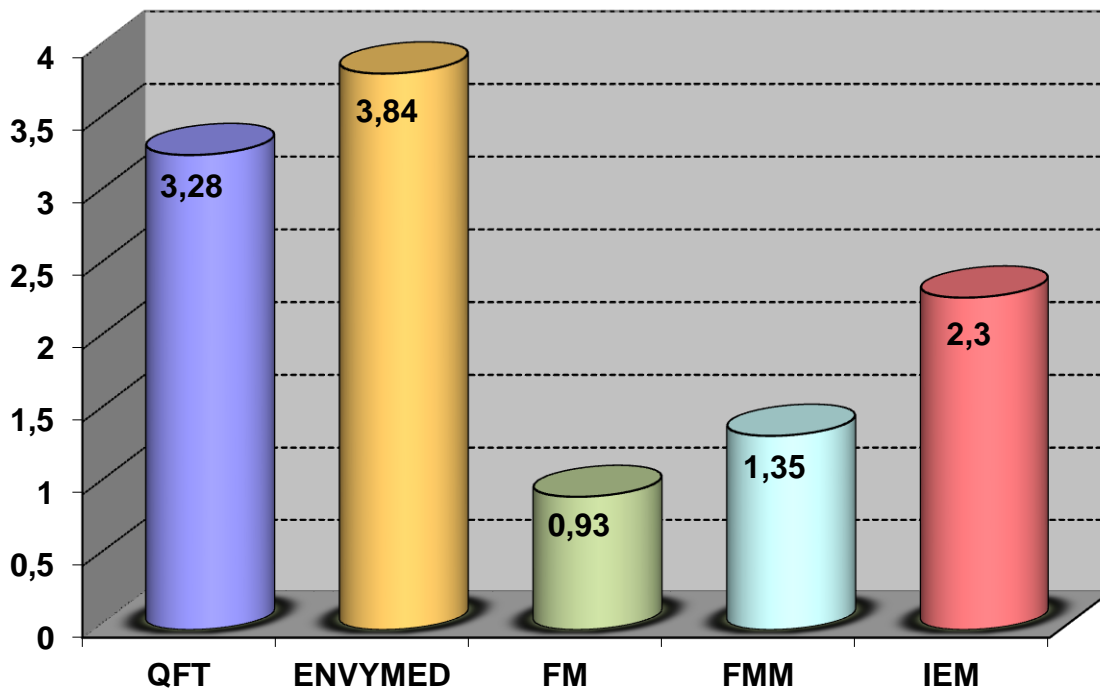
¹In parenthesis, papers shared with other Departments.

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS

- **Ratio por investigador senior** (personal de plantilla más contratados “Ramón y Cajal”) / *Ratio by senior researcher* (staff plus “Ramón y Cajal”).



- **Ratio por personal científico** (sin incluir personal de apoyo) / *Ratio by scientific staff* (excluding support staff).



(See “Department Key” in section 7.3)

- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior** / *Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher: 3,78*

Introducción	2
Introduction	3
1. Estructura del Instituto / Structure of the Institute	4
Dirección / Direction	5
Junta de Instituto / Institute Board.....	5
Claustro Científico / Scientific Staff.....	5
Departamentos de Investigación / Research Departments.....	6
Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	6
Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	7
Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	8
Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	8
Unidad de Gestión Económica-Administrativa / Financial and Administrative Office	9
Servicios del Centro de Física Miguel A. Catalán / Service Units of the Center of Physics CFMAC.....	10
2A. Labor Investigadora	11
2A.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	12
2A.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados.....	18
2A.3 Dpto. de Física Molecular.....	27
2A.4 Dpto. de Física Macromolecular.....	33
2B. Research Activities	39
2B.1 Theoretical Physics and Chemistry Dept.	40
2B.2 Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy Dept.....	46
2B.3 Molecular Physics Dept.	55
2B.4 Macromolecular Physics Dept.....	61
3. Proyectos de Investigación / Research Grants	67
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	68
3.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	70
3.3 Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	72
3.4 Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	74
4. Cooperación Científica / Scientific Cooperation	76
4.1 Congresos y Reuniones / Congresses and Meetings.....	77
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas/. Theoretical Physics and Chemistry	77
4.1.2 Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	79

4.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics	82
4.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	84
4.2	Estancias de Investigadores en el Instituto / Visitors	86
4.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	86
4.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	86
4.3	Conferencias de Investigadores Invitados / Invited Researches Conferences.....	87
4.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	87
4.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	92
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	92
4.4	Visitas de Investigadores a Centros Internacionales / Visits to Foreign Institutions	92
4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	92
4.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	93
4.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	93
5.	Labor Docente, Difusión de la Ciencia y Otras Actividades / Teaching, Outreach, and Other Activities	94
5.1	Docencia / Teaching	95
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	95
5.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	96
5.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	96
5.2	Cursos, Conferencias y Seminarios / Courses, Conferences and Seminars	97
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	97
5.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	98
5.2.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	99
5.2.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	100
5.3	Premios y Otros Méritos /Awards.....	100
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	100
5.3.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	101
5.3.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	101
5.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	102
5.4	Actividades y Material de Divulgación / Outreach Activities and Material	103
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/Theoretical Physics and Chemistry	103
5.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	106
5.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	107

5.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	107
5.5	Transferencia de Tecnología / Transfer of Technology	107
5.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	107
5.5.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	108
5.6	Unidades Asociadas y Otras Actividades / Associated Units and Other Activities	108
5.6.1.	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	108
5.6.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	108
5.6.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	109
5.6.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	109
6.	Publicaciones y Producción Científica / Publications and Scientific Production.....	110
6.1	Publicaciones en Revistas y Proceedings ISI / ISI Publications	111
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	111
6.1.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy.....	114
6.1.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	122
6.1.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics.....	123
6.2	Publicaciones en Revistas No JCR-ISI / Non JCR-ISI Publications.....	125
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry.....	125
6.2.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	125
6.3	Libros, Monografías y otras Publicaciones de Proceedings / Books, Proceedings, and Other Publications	126
6.3.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	126
6.4	Tesis Doctorales / PhD Theses	126
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	126
6.4.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	126
6.4.3	Dpto. de Física Molecular/ Molecular Physics.....	127
6.4.4	Dpto. de Física Macromolecular/ Macromolecular Physics	127
6.5	Trabajos de Máster, Grado y Otras Titulaciones/Master, Grade and Other Degrees Theses	127
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas/ Theoretical Physics and Chemistry	127
6.5.2	Dpto. de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y de Medios Desordenados/ Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy	128
7.	Tablas y Datos / Tables and Data	129
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico / Data compared to expectations from the Strategic Plan	130

7.2	Resumen de publicaciones en revistas JCR-ISI / Summary of publications in JCR-ISI journals	130
7.3	Evolución del índice de impacto (revistas JCR-ISI) por Departamentos / Evolution of the impact factor (JCR-ISI-Journals) by Departments	132
7.4	Personal por Departamentos / Personnel by Departments	133
7.5	Número de publicaciones por Departamentos / Number of publications by Departments	133
7.6	Ratio de publicaciones JCR-ISI por Departamentos / Ratio of JCR-ISI publications by Departments	134