

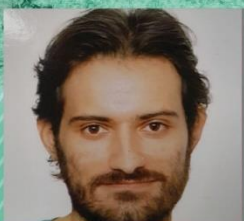
IEM
CSIC

Instituto de Estructura de la Materia

1ª JORNADA DE

INVESTIGADORES NOVELES DEL IEM

20
Octubre
2022



ÁLVARO BUENDÍA
Espectroscopía Nuclear, Vibracional
y de Medios Desordenados



ÁNGEL L CORPS
Química y Física Teóricas



JOSÉ SENA
Física Macromolecular



PATRICIA MARTÍNEZ
Física Macromolecular



ANDRÉS CARDIL TORNOS
Física Macromolecular



JOSE LUIS PURA
Espectroscopía Nuclear, Vibracional
y de Medios Desordenados



CARLOS ÁLVAREZ NICOLÁS
Física Molecular



ANA CRESPO
Espectroscopía Nuclear, Vibracional
y de Medios Desordenados



FRANCISCA FUENZALIDA
Espectroscopía Nuclear, Vibracional
y de Medios Desordenados

Presentaciones orales
de jóvenes científicos del IEM

**Premio a la mejor
contribución**

 Sala de conferencias
Serrano 121

Retransmisión en streaming
por el canal de Youtube del IEM

1º JORNADA DE INVESTIGADORES NOVELES DEL IEM

Jueves, 20 de OCTUBRE de 2022

HORA	
10:00-10:10	PRESENTACIÓN DE LA JORNADA
10:15-10:30	Degradación de microplásticos en agua de mar: técnicas de análisis y conservación de materiales
	Ana Crespo Ibáñez
10:35-10:50	Towards controlling light at the nanoscale
	Álvaro Buendía Gallego
10:55-11:10	Rotational and vibrational relaxation of CO2 in supersonic jets
	Carlos Álvarez Nicolás
11:15-11:30	Dinámica de no equilibrio y transiciones de fase en mecánica cuántica
	Ángel López Corps
11:35-12:00	PAUSA
12:00-12:15	The fear of periodic surfaces to water
	Patricia Martínez García
12:20-13:35	SERS detection of glyphosate: Development of a new highly selective and sensitive method
	Francisca Belén Fuenzalida
12:40-12:55	P3HT:PCBM, the most efficient organic solar cell material... and more
	José Sena Fernández
13:00-13:15	Reología de nanogeles de poli(glicidil metacrilato)
	Andrés Cardil Tornos
13:20-13:35	Bound states in the continuum, the physics behind the paradox.
	José Luis Pura Ruíz



Ana Crespo Ibáñez

Grupo de Espectroscopías Ópticas
en Nanoestructuras Plasmónicas y Semiconductoras
Departamento ENVIMED

BIO

Licenciada en Química
(UCM)

Máster de Ciencia e
Ingeniería de Materiales
Universidad Carlos III
(premio extraordinario
por el diseño de un
dispositivo de medidas
electroquímicas en
campo)

Doctora en Ciencia e
Ingeniería de Materiales
(Universidad Carlos III)

Actualmente Personal
Técnico de Apoyo

Deterioro del patrimonio sumergido por efecto de contaminantes plásticos

Ana Crespo Ibañez, Eliana Rodríguez Cabrera, Sagrario Martínez Ramírez, Santiago Sánchez Cortés

El patrimonio cultural sumergido incluye todos los rastros de existencia humana que tengan un carácter cultural, histórico o arqueológico, que hayan estado bajo el agua durante al menos 100 años. En el caso del medio marino, la alta concentración de sales, especialmente cloruros, juntos con la presencia de microorganismos, provoca el deterioro de los bienes sumergidos. A pesar de ello, la tendencia actual para la salvaguarda del patrimonio sumergido es la conservación in situ, ya que la extracción de piezas genera una enorme degradación de los materiales que en muchos casos conlleva la pérdida irreversible de información histórica. Sin embargo, el cambio climático plantea un nuevo escenario en la degradación de materiales por efectos atmosféricos donde las metodologías de conservación in situ pueden dejar de ser recomendables o viables.

En este contexto, uno de los múltiples retos actuales es la gestión de residuos plásticos, los cuales generan una gran cantidad de toneladas de vertidos que terminan en el mar. Durante el proceso de degradación de los plásticos se produce su fragmentación generándose lo que se conoce como microplásticos, que se depositan en el fondo marino, y liberándose sustancias al medio como los aditivos. El efecto de estos nuevos contaminantes puede acelerar el proceso de degradación de los materiales que conforman el patrimonio sumergido ya que se modifica el entorno. El estudio de estas nuevas variables podrá determinar si la conservación in situ sigue siendo la metodología más adecuada para preservar el patrimonio sumergido.



Álvaro Buendía
Departamento ENVIMED

BIO

Grado en Física por la Universidad Autónoma de Madrid.

Máster de Ciencia y Tecnologías Cuánticas en Bilbao.

Desde 2020 realizando su tesis sobre redes de nanopartículas topológicas en el Departamento de Espectroscopía Nuclear, Vibracional y Medios Desordenados del IEM con un contrato FPI.

Manipulando robustamente la luz en la nanoescala

Álvaro Buendía, Vincenzo Giannini, Jose A. Sánchez Gil

Las nanopartículas metálicas interaccionan fuertemente con la luz visible debido a sus resonancias plasmónicas. Cuando estas nanopartículas son ordenadas en redes se producen resonancias colectivas aún más fuertes. Estas resonancias tienen aplicaciones en espectroscopía (SERS), biosensores, placas solares, fotónica...

La topología ofrece una mayor protección a estas resonancias colectivas; cuando las redes están protegidas por determinadas simetrías, aparecen resonancias muy robustas localizadas en sus bordes. Esto puede ser utilizado para guiar robustamente la luz en la nanoescala.



Carlos Álvarez Nicolás

Laboratorio de Fluidodinámica Molecular
Departamento de Física Molecular

BIO

Grado en Físicas (UCM).
Máster interuniversitario
en Física Nuclear.

Estudiante PhD con una
beca FPI en el
departamento de Física
Molecular

Rotational and vibrational relaxation of CO₂ in supersonic jets

Carlos Álvarez Nicolás, Jose María Fernández, Guzmán Tejada

Supersonic gas jets are a well-suited medium to study the inelastic collisions between molecules under non-local thermodynamic equilibrium (n-LTE) conditions. Inelastic collisions are the main mechanism involved in the relaxation of the internal motions of these molecules. We present an original approach to the CO₂ relaxation problem. We probed several supersonic jets from hot nozzles by Raman spectroscopy with high-spatial resolution. The intensity of the observed Raman signal allows us to measure both the individual populations of the rotational and vibrational energy levels of the molecules, as well as their total number density at different points along the jet axis. From these measured quantities, vibrational, rotational, and translational temperatures were retrieved at each point, illustrating the breakdown of equilibrium between these degrees of freedom



Ángel L. Corps

Teoría de la Materia Condensada
Departamento de Física y Química Teóricas

Dinámica de no equilibrio y transiciones de fase en mecánica cuántica

BIO

Graduado en Física y Matemáticas (UCM).

Máster en Física teórica (UCM).

Estudiante de doctorado en dinámica cuántica

Cuando un sistema se encuentra fuera del equilibrio, sus variables de estado varían en el tiempo, y en muchas ocasiones lo hacen hacia un estado de equilibrio asintótico. Por su lado, una transición de fase es un proceso que provoca un cambio brusco en alguna cantidad de un sistema bajo ciertas condiciones. Las transiciones de fase pueden venir asociadas a la noción de ruptura de simetría, que da lugar a distintas fases caracterizadas por un parámetro de orden. Aunque clásicamente estas cuestiones se comprenden razonablemente bien, su paso a la mecánica cuántica conlleva una serie de preguntas en las que se trabaja intensamente en la actualidad. Además de las archiconocidas transiciones de fase térmicas, que se producen a una cierta temperatura crítica, encontramos transiciones de fase de estado fundamental, que ocurren a temperatura cero, y también transiciones de fase a una cierta energía de excitación, que implican importantes efectos dinámicos. Es común que ambos tipos de transiciones aparezcan simultáneamente en sistemas cuánticos colectivos, en los que cada constituyente interactúa con todos los demás: se dice que el alcance de la interacción es infinita. Resulta que este tipo de modelos son ampliamente utilizados, por ejemplo, para el estudio de ciertas propiedades magnéticas o la interacción de luz con la materia, entre otros. Son modelos que, además, son experimentalmente realizables con átomos fríos y redes ópticas, con ayuda de los cuales se puede modelizar gases de Fermi degenerados.

Cuánticamente, un proceso de no equilibrio se puede provocar modificando algún parámetro de control del Hamiltoniano que describe el sistema. Como consecuencia, el estado inicial escogido deja de ser estacionario. Ello permite monitorizar en el tiempo determinados observables físicos de interés, cuya evolución a menudo desvela la existencia de fases cuánticas claramente distintas, caracterizadas, por ejemplo, por valores cualitativamente distintos de la magnetización global. El cambio de fase está conectado con un cambio brusco en el valor del parámetro de orden, obtenido como el valor asintótico en el tiempo que toma el observable determinado. En esta presentación mostraré cómo esta transición de fase, dinámica, viene causada por una transición de fase de estados excitados, que es esencialmente un fenómeno estático. En última instancia, la transición tiene su origen en el límite termodinámico, cuya dinámica coincide con la del límite clásico del sistema cuántico.



Patricia Martínez García

SOFTMATPOL

Departamento de Física Macromolecular

BIO

Graduated in physics
(UCM)

Master's degree in
Biomedical Physics at
the UCM.

I work in the Soft and
Polymeric Matter group
(SOFTMATPOL) in
collaboration with IQFR
as a research assistant
with a 2-year Garantía
Juvenil contract.

The fear of periodic surfaces to water

Patricia Martínez García, Esther Rebollar, Tiberio A. Ezquerro,
Gonzalo Santoro, Aurora Nogales, Mari Cruz García

In nature, there are different types of materials with regard to how they interact with water: hydrophobic and hydrophilic. In hydrophobic materials the water forms a contact angle with the surface greater than 90° , while it is less than 90° in the case of hydrophilic materials.

The contact angle depends on the chemical composition and surface topography.

Therefore, the aim of my work is to modify these parameters to evaluate how this affects the wettability of a number of polymers. The techniques employed to carry out this objective are going to be: Laser-Induced Periodic Surface Structures (LIPSS), Laser Interference Lithography (LIL), laser ablation and 3D printing.

Finally, the topography of these polymers before and after irradiation will be evaluated by means of an Atomic Force Microscope (AFM) and the evolution of their wettability by measuring the contact angle on the samples.



Francisca Belén Fuenzalida Sandoval

Grupo de Espectroscopías Ópticas
en Nanoestructuras Plasmónicas y Semiconductoras
Departamento ENVIMED

BIO

Licenciada en
Ciencias
Ambientales con
mención en
Química

Título de Química
Ambiental

Máster en Ciencias
Químicas
Universidad de
Chile.

Actualmente
estudiante de
doctorado en
biofísica en la UPJS
(Kosice, Eslovaquia)
Erasmus en el CSIC

SERS detection of glyphosate: Development of a new highly selective and sensitive method.

F. Fuenzalida Sandoval, S. Sánchez-Cortés, P. Miškovský, Z. Jurašková

El glifosato es un herbicida sistémico de amplio espectro introducido con su nombre comercial Roundup en 1974 para el control de malezas en campos de producción agrícola. En el siglo XX su uso aumentó drásticamente, lo que ha llevado a la acumulación de este compuesto en productos comestibles y en el medio ambiente. La exposición crónica al compuesto puede inducir diferentes enfermedades tales como la intolerancia al gluten, diabetes, enfermedad cardíaca, esclerosis múltiple, enfermedad de Alzheimer, autismo así como defectos de nacimiento. Dados estos antecedentes, es de gran importancia contar con un método de detección y cuantificación simple, rápido y de bajo costo que se pueda utilizar en el campo para el monitoreo del glifosato.

En la actualidad, existen varios estudios teóricos y experimentales centrados en las técnicas Raman y SERS del glifosato. Sin embargo, el uso de la técnica SERS para analizar glifosato presenta el inconveniente de la alta polaridad del pesticida lo que dificulta el acercamiento de moléculas de glifosato hacia la superficie de las nanoestructuras metálicas, que es una condición necesaria para generar altas señales SERS. Bajo este contexto, en este trabajo se presenta una nueva estrategia para la mejora de la afinidad de glifosato hacia las nanoestructuras metálicas basadas en el desarrollo de un método consistente en la modificación química del glifosato que incorpora en su estructura el grupo tiol. Esta nueva línea de trabajo permite aumentar significativamente la afinidad del compuesto hacia la superficie de los coloides metálicos y por consecuencia, se induce una detección más sensible del glifosato mediante la técnica SERS.



José Sena

SOFTMATPOL

Departamento de Física Macromolecular

BIO

Grado en Química
(Universidad
Complutense de
Madrid)

Máster Ciencia y
tecnología Químicas
(Universidad
Complutense de
Madrid)

Actualmente, haciendo
la tesis en el grupo Soft
and Polymeric Matter
(SOFTMATPOL) del
departamento de Física
Macromolecular con un
contrato FPI

P3HT:PCBM, the most efficient organic solar cell material... and more

José Sena, Esther Rebollar, Aurora Nogales

Semiconductor polymers have been the subject of great interest due to, mainly, their optical, electronic, mechanical, light-weight, low cost, biocompatibility, or chemical/structural processability, and, consequently, the development of conjugated polymers has advanced dramatically in recent years. In the last decade, special interest has been placed in studying these materials by nanostructuring to increase effective area and improve and maximize their properties. These nanostructured polymers can be prepared in the form of nanoparticles to form water-based functional inks, which are environmentally friendly, and their size and structure can be tuned by playing with preparation conditions. In our group, semiconducting polymer nanoparticles have been prepared by two methods, miniemulsion, and flash.

Of the many materials that have been studied so far, the poly(3-hexyl thiophene):[6,6]-Phenyl-C71-butyric acid methyl ester (P3HT:PCBM) is one of the paradigmatic donor polymer-acceptor molecule systems. In general, research in this system has been oriented to improving the performance of organic solar cells. However, P3HT:PCBM can find many more applications, such as sensors, photocatalysis, photodetectors, transistors, and bioelectronics.

In this presentation, I will focus on photocatalysis, one of the applications that is booming due to the current lack of clean water caused by pollution. Specifically, I will focus on pollution due to organic dyes, widely used in the textile industry, which impurify large amounts of drinking water per year and, furthermore, are very difficult to treat and eliminate.



Andrés Cardil Tornos

BIOPHYM

Departamento de Física Macromolecular

Reología de nanogeles de poli(glicidil metacrilato)

A Cardil, JF Vega

BIO

Grado de Química (UAH)

Máster de alta especialización en plásticos y caucho de la UIMP/CSIC.

Actualmente realizando el doctorado en el Departamento de Física Macromolecular del CSIC.

El glicidil metacrilato es un monómero de elevado interés sintético. Siendo posible la obtención selectiva de polímeros funcionalizados gracias a sus 2 grupos reactivos, cuando solo uno de ellos reacciona durante la polimerización. Para la síntesis de estos sistemas se ha usado una polimerización novedosa mediada por complejos homometálicos y heterometálicos de aluminio, dando lugar a complejos ensamblados de escala nanométrica. Los tamaños hidrodinámicos de estas nanopartículas oscilan entre 10 y 40 nm, pero en una superficie plana adoptan la

forma de un disco fino, debido a la baja temperatura de transición vítrea del polímero (por debajo de ambiente). Al mismo tiempo, los módulos dinámicos se han medido en un amplio rango de temperaturas y se ha obtenido la curva reológica maestra de la respuesta viscoelástica completa, desde la zona vítrea a la terminal, aplicando el principio de superposición tiempo temperatura. Estas estructuras macromoleculares presentan una relajación viscoelástica característica, con la ausencia de un plateau elástico intermedio, indicativa de polímeros sin entrelazamientos. La huella viscoelástica lineal muestra dinámicas tipo Zimm a frecuencias intermedias típicas de sistemas no entrelazados. Este comportamiento se asemeja al observado en estrellas muy funcionalizadas, dendrímeros, coloides blandos y microgeles. Estos sistemas tienen diversas aplicaciones médicas gracias a su biocompatibilidad, como nanoportadores de péptidos/medicamentos, recubrimientos de heridas y tejidos o andamiajes bioactivos.



José Luis Pura Ruíz

Grupo de Espectroscopías Ópticas
en Nanoestructuras Plasmónicas y Semicondutoras
Departamento ENVIMED

Bound states in the continuum, the physics behind the paradox

Jose Luis Pura, José A. Sánchez-Gil

BIO

Licenciatura en Física
(Universidad de
Valladolid)

Máster Interuniversitario
en Nanociencia y
Nanotecnología
Molecular (Universidad
de Alicante).

Doctor en Física
(Universidad de
Valladolid)

Actualmente,
Investigador
Postdoctoral Margarita
Salas

Las metasuperficies dieléctricas son estructuras fotónicas bidimensionales cuyos constituyentes tienen tamaños inferiores a la longitud de onda de trabajo. Sus propiedades únicas y la posibilidad de modificarlas a demanda las hacen muy interesantes en gran variedad de aplicaciones como: filtros espectrales, polarizadores, lentes, moduladores ópticos, elementos no lineales, o emisión láser.

Uno de los fenómenos más interesantes relacionado con las metasuperficies dieléctricas es la aparición de estados ligados en el continuo, o BICs por sus siglas en inglés (Bound states In the Continuum). Los BICs son estados de luz confinados espacialmente pero cuyos posibles canales de radiación se encuentran suprimidos, bien sea por las condiciones de simetría del sistema (symmetry protected BICs) o por interferencia destructiva de unos canales con otros (accidental BICs). La principal característica distintiva de los BICs son los valores teóricamente infinitos del factor de calidad Q , parámetro esencial en aplicaciones como la emisión láser. Esto resulta directamente en valores muy pequeños de la anchura espectral en magnitudes como la reflectividad, lo que es ideal para aplicaciones que requieran una alta monocromaticidad como por ejemplo filtros espectrales.