

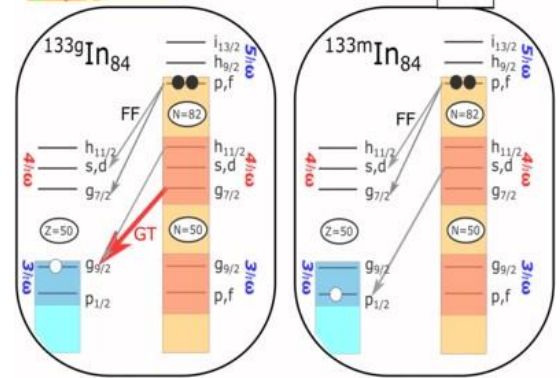
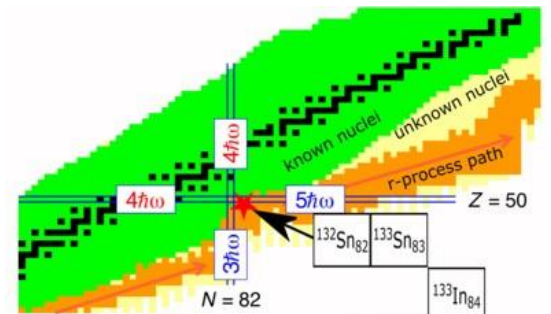
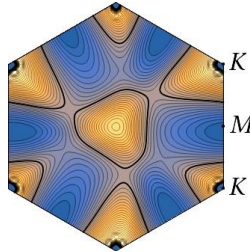
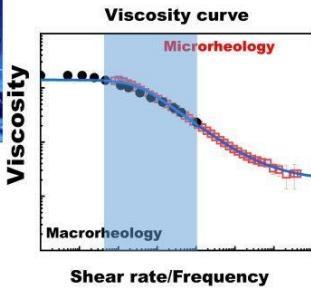
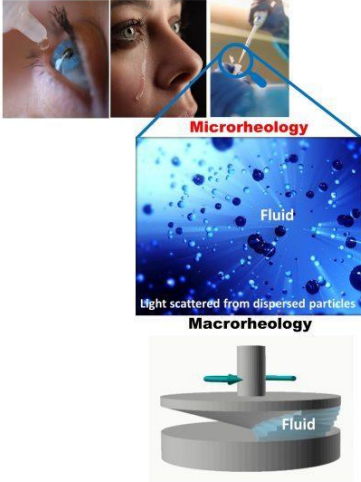
Instituto de Estructura de la Materia

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

Memoria 2023

Annual Report 2023

Artificial and natural tears



SUMARIO

INTRODUCCIÓN	4
INTRODUCTION	5
CAPÍTULO 1 – ESTRUCTURA DEL INSTITUTO/ Structure of the Institute	6
DIRECCIÓN / DIRECTION	6
JUNTA DE INSTITUTO / INSTITUTE BOARD	6
CLAUSTRO CIENTÍFICO / SCIENTIFIC STAFF	6
DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN / RESEARCH DEPARTMENTS	7
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY	7
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS/ NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY	8
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS	10
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS	11
UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA / FINANCIAL AND ADMINISTRATIVE OFFICE	12
SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN / SERVICE UNITS OF THE CENTER OF PHYSICS CFMAC	13
CAPÍTULO 2A – LABOR INVESTIGADORA	14
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA	14
DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS	23
DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR	41
DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR	48
CHAPTER 2B – RESEARCH ACTIVITIES	55
THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT	55
NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT	63
MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT	79
MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT	86
CAPÍTULO 3 – PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN / Research Grants	93
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY	93
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY	94
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS	99
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS	100
CAPÍTULO 4 – COOPERACIÓN CIENTÍFICA/ Scientific Cooperation	103
CONGRESOS Y REUNIONES - Congresses and Meetings	103
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY	103
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADO / NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY	106
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS	109
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS	111

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO / Visitors	112
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	112
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	113
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	114
CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS / Invited Researched Conferences	114
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	114
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	114
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	115
VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES - Visits to Foreing Institutions	115
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	115
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	115
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	116
CAPÍTULO 5 – LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES / Teaching, Outreach and Other Activities	117
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	117
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	117
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	118
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	118
CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS / Courses, Conferences and Seminars	119
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	119
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	120
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	121
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	121
PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / Awards	122
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	122
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	123
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	123
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	124
ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / Outreach Activities and Material	124
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	124
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	125
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	125
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	126
TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / Transfer of Technology	129
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	129
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	130
UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES / Associated Units and Other Activities	130
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	130
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	131

DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	132
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	132
CAPÍTULO 6 – PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN CIENTÍFICA / <i>Publications and Scientific Production</i>	133
PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI / <i>ISI Publications</i>	133
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	133
DPTO. ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS	136
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	145
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	146
PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / <i>NON JCR-ISI Publications</i>	148
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	148
LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / <i>Books, Proceedings and Other Publications</i>	148
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	148
DPTO. FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	149
DPTO. FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	149
BASE DE DATOS Y CÓDIGOS INFORMÁTICOS DE ACCESO ABIERTO / <i>Open Access Data Bases and Computer codes</i>	150
DPTO. QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	150
TESIS DOCTORALES / <i>Ph.D. Theses</i>	150
DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	150
DPTO. DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS / <i>NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY</i>	151
TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES / <i>Master, Grade and Other Degrees Theses</i>	151
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / <i>THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY</i>	151
DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / <i>MOLECULAR PHYSICS</i>	152
DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / <i>MACROMOLECULAR PHYSICS</i>	152
CAPÍTULO 7 – TABLAS Y DATOS / <i>Tables and Data</i>	153
INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN / <i>PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS</i>	153
RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI / <i>SUMMARY OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS</i>	153
EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR-ISI) POR DEPARTAMENTOS / <i>EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS</i>	155
PERSONAL POR DEPARTAMENTOS	156
NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS	156
RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS / <i>RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS</i>	157

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 2023, las actividades de investigación han estado organizadas alrededor de cuatro Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Astrofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física, Ciencia de los Materiales y Biofísica.

En sus comienzos en 1976, el instituto contaba con cinco científicos en plantilla. En la actualidad, acoge a treinta y ocho 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 Informática, Mantenimiento, Almacén, Taller Mecánico, Taller Óptico y Conserjería, son prestados por el CFMAC y compartidos con los otros Institutos que forman dicho Centro.

La misión del IEM es contribuir al avance del conocimiento en las principales líneas de investigación del Instituto, generar sinergias entre los distintos Grupos de Investigación que lo componen, aprovechando su carácter multidisciplinar y sus enfoques teórico/experimental y de ciencia básica y aplicada, y contribuir a la formación de personal científico en las distintas etapas de la carrera investigadora. La visión del IEM es convertirse en un instituto de referencia en la frontera de la actividad científica representada por la investigación que en él se desarrolla para contribuir de forma decisiva a resolver los principales retos que la sociedad afronta. Esta actividad científica ha quedado plasmada, durante el año 2023, en 97 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 2023, research activities have been organized around four Departments with experimental and theoretical groups whose scientific fields include Nuclear Physics, Statistics, Molecular, and Macromolecular Physics, Biophysics, Astrophysics, Physics of Condensed Matter, and Gravitational Physics. Part of this research has involved the use of large national and international facilities. The research activity is concentrated in the area of Physics, but with applications in Physical Chemistry, Materials Science and Biophysics.

In its beginnings in 1976 the institute had five scientists on staff. Currently, IEM hosts around thirty-eight 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 Computing, Maintenance and Warehouse Services, the Mechanical Workshop, the Optical Workshop and the Receptionists, are provided by the CFMAC and shared with the other Institutes that form the Centre.

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

This scientific activity, during 2023, has crystallized in 97 ISI publications.

CAPÍTULO 1 – ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1 - INSTITUTE ORGANIZATION

DIRECCIÓN / *DIRECTION*

Director / Director:	Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Vicedirector 1º / Assistant Director 1 st :	Dr. Rafael A. Molina Fernández
Vicedirector 2º / Assistant Director 2 nd :	Dra. M ^a Luisa Senent Diez
Gerente / Manager:	D ^a . Isabel Llerena de Frutos

JUNTA DE INSTITUTO / *INSTITUTE BOARD*

Presidente / President:	Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Secretaria / Secretary:	D ^a . Isabel Llerena de Frutos

Vocales / Members:

Dr. Carlos Cabrillo García	Dr. Rafael A. Molina Fernández
D ^a . M ^a Carmen García Collado	Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dra. M ^a Cruz García Gutiérrez	Dra. M ^a Luisa Senent Diez
Dr. Eduardo Garrido Bellido	Dr. Guzmán Tejeda Gala
Dr. Guillermo A. Mena Marugán	Dr. Vicente Timón Salinero

CLAUSTRO CIENTÍFICO / *SCIENTIFIC STAFF*

Presidente / President:	Prof. Tiberio Ezquerro Sanz
Secretario / Secretary:	Dr. Ramón Peláez de Fuentes

Personal Investigador / Scientific staff:

Dr. Luis A. Acosta Sánchez	Dra. Belén Maté Naya
Prof. J. Fernando Barbero González	Dr. Guillermo A. Mena Marugán
Dr. Carlos Cabrillo García	Dr. Rafael A. Molina Fernández
Dr. Gianluca Calcagni	Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dra. M ^a Vega Cañamares Arribas	Dr. Bruno Olaizola Mampaso
Dra. María José Capitán Aranda	Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dr. Víctor Cruz Cañas	Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
Dr. José Luis Doménech Martínez	Dr. Christophe Rappold
Dr. Ricardo Fernández Perea	Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José M. Fernández Sánchez	Dr. José Antonio Sánchez Gil
Prof ^a . María José García Borge	Dr. Gonzalo Santoro Domingo
Dra. María Cruz García Gutiérrez	Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Dr. Eduardo Garrido Bellido	Prof. Pedro Sarriguren Suquibide
Prof. José González Carmona	Dra. M ^a Luisa Senent Diez
Prof. Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga	Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dra. Andrea Jungclaus	Dr. Guzmán Tejeda Gala
Prf ^a . Teresa Kurtukian Nieto	Prof. Olof E. I. Tengblad
Dra. M ^a del Sagrario Martínez Ramírez	Dr. Vicente Timón Salinero
Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres	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. Guillermo Antonio Mena Marugán Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Dr. José González Carmona Profesor de Investigación / Research Professor
Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide Profesor de Investigación / Research Professor
Dr. Jorge Dukelsky Bercovich Profesor de Investigación Ad Honorem
/ Research Professor Ad Honorem

Dr. Jesús Fernando Barbero González Investigador Científico / Research Scientist
Dr. Eduardo Garrido Bellido Investigador Científico / Research Scientist
Dra. María Luisa Senent Diez Investigadora Científica/ Research Scientist
Dr. Gianluca Calcagni Científico Titular / Tenured Scientist
Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández Científico Titular / Tenured Scientist

D. Ángel López Corps Contrato Predoctoral La Caixa /
PhD Fellowship La Caixa
D. Iván Salvador García Beca JAE Intro / Scholarship JAEI
D. Alejandro S. Gómez Gómez Beca JAE Intro / Scholarship JAEI
D. Pablo Santo-Tomás Ros Beca JAE Intro / Scholarship JAEI

D^a Marta García Olmos Otros (Estudiante Doctorado) /
Others (PhD Student)
D. Andrés Mínguez Sánchez Otros (Estudiante de Doctorado) /
Others (PhD Student)
D. Álvaro Torres Caballeros Otros (Estudiante de Doctorado) /
Others (PhD Student)

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

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Carlos Cabrillo García Investigador Científico / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Profª. Mª José García Borge	Profesora de Investigación /Research Professor
Profª. Teresa Kurtukian Nieto	Profesora de Investigación (desde 3 julio) /Research Professor (since July 3rd)
Prof. Olof Erik Tengblad	Profesor de Investigación / Research Professor
Dra. Andrea Jungclaus	Investigadora Científica / Research Scientist
Dr. Santiago Sánchez Cortés	Investigador Científico / Research Scientist
Dr. José Antonio Sánchez Gil	Investigador Científico / Research Scientist
Dr. Luis Armando Acosta Sánchez	Científico Titular (desde 20 diciembre) / Tenured Scientist (since December 20th)
Dra. Mª Vega Cañamares Arribas	Científica Titular / Tenured Scientist
Dr. Ricardo Fernández Perea	Científico Titular / Tenured Scientist
Dra. Sagrario Martínez Ramírez	Científica Titular / Tenured Scientist
Dr. Bruno Olaizola Mampaso	Contrato Ramón y Cajal (desde 1 enero) / R&C Contract (since January 1st)
Dr. Christophe Marie Jean Rappold	Contrato Postdoctoral Atracción Talento Investigador CM / Postdoc Contract CM
Dra. Ana Crespo Ibáñez	Contrato Personal Técnico de Apoyo / PTA Contract
D. Jaime Acosta Loza	Contrato de Titulado Sup.-C/P / University Graduate
D. Vicente García Távora	Contrato de Titulado Superior C/P (hasta 15 septiembre) / University Graduate (until September 15th)
D. Álvaro Buendía Gallego	Contrato Predoctoral FPI / PhD Fellowship FPI
D. Daniel Fernández Ruiz	Contrato Predoctoral FPI /PhD Fellowship
D. Carlos Ferrera González	Contrato Predoctoral FPI / PhD Fellowship
D. Samuel Escrig López	Contrato Predoc. CM / PhD Fellowship CM
Dª Amanda N. Nerio Aguirre	Titulado Superior Contratado cargo a proyecto / University Graduate
D. Jesús Sánchez Prieto	Contrato Predoctoral C/P (desde 1 sept.) / PhD Fellowship C/P (since Sept. 1st)
Dª Beatriz Castillo López de Larrinzar	Contrato Fondos EU-PRTR (desde 1 noviembre) / Funds EU Contract (since November 1st)

D. Juan Francisco González Linares
D^a Lucía Hidalgo Arteaga
D. José Luis Pura Ruiz

Beca JAE Intro / Scholarship JAEI
Beca JAE Intro / Scholarship JAEI
Estancia Temporal (hasta 31 dic.) /
Authorized Stay (until December 31st)

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Ángel Perea Martínez
D^a. Jessica Roldán Coronel

Técnico Superior Especializado OPIS /
Specialized University Graduate
Titulado Superior Contratado con C/P
(hasta 30 junio) / University Graduate
(until June 30th)

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR
MOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dr. Guzmán Tejada Gala Científico Titular / TenuredScientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. José Luis Domenech Martínez Investigador Científico / Research Scientist

Dr. José María Fernández Sánchez Investigador Científico / Research Scientist

Dra. Isabel Tanarro Onrubia Investigadora Científica / Research Scientist

Dra. Belén Maté Naya Científico Titular / TenuredScientist

Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres Científico Titular / TenuredScientist

Dr. Juan Ortigoso Martínez Científico Titular / TenuredScientist

Dr. Ramón Javier Peláez de Fuentes Científico Titular / TenuredScientist

Dr. Julio Francisco Santos Gómez Científico Titular / TenuredScientist

Dr. Vicente Timón Salinero Científico Titular / TenuredScientist

D. Carlos Álvarez Nicolás Contratado Predoctoral FPI (hasta 30 junio) /
PhD Fellowship (until June 30th) Contratado
cargo a Proyecto (desde 1 septiembre) /
Contract C/P (until September 1st)

D^a Laura García Déniz Beca JAE Intro / Scholarship JAEI

D. Mario García Hernández Beca JAE Intro / Scholarship JAEI

D. Denís Paredes Roibás Otros (Estudiante de Doctorado) /
Others (PhD Student)

D. José Antonio Quiñonero Gris Estancia Temporal / Authorized Stay

Personal de apoyo / Support Staff:

D. Miguel Ángel Moreno Alba Ayudante de Investigación de OPI /
ResearchAssistant OPI

D. Ángel Luis González Valdenebro Técnico Especializado de OPI/
Specialist Technician OPI

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR
MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. Mari Cruz García Gutiérrez Investigadora Científica / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A Ezquerra Profesor de Investigación / Research Professor

Dra. Aurora Nogales Ruíz Investigadora Científica / Research Scientist

Dra. María José Capitán Aranda Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Victor Luis Cruz Cañas Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Francisco Vega Borrego Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Gonzalo Santoro Domingo Científico Titular (desde 29 diciembre) /
Tenured Scientist (since Dec. 29th)

Investigador Contratado RyC (hasta 28 de
diciembre) / Contrat R&C (until Dec. 28th)

D. José Sena Fernández Contrato Predoctoral FPI / PhD Fellowship

D. Andrés Cardil Tornos Contrato de Titulado Superior C/P / University
Graduate

D. Jorge Duro Sánchez Contrato - Cargo a Proyecto (desde 1 mayo) /
Contract-C/P (since May 1st)

Dña. Emma Franco Mateos Titulada Superior Contratada (hasta 30 de
noviembre) / University Graduate (until 30th of
November)

D. Iván Horcajo Peribáñez Contrato Fondos EU-PRTR (desde 1 Dic.) /
Funds EU Contract (since December 1st)
Contrato Plan Investigo (hasta 30 oct.) /
Contract (until Oct. 30th)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara Titulado Superior Espec. OPIS (jubilación 1
septiembre) / Specialized University Graduate
(retired Sept.1st)

Dra. Virginia Souza-Egipsy Sánchez Titulado Superior Especializado OPIS /
Specialized University Graduate

D. Carlos García García Contrato GARJUR - CM (desde 1 febrero) /
Contract GARJUR – CM (since February 1st)

D^a. Patricia Martínez García Contrato GARJUR - CM (hasta 31 mayo) /
Contract GARJUR – CM (until May 31st)

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA
FINANCES AND ADMINISTRATION

D ^a . M ^a Isabel Llerena de Frutos	C. Técnico Especializado de OPI / <i>Specialist Technician OPIs</i>
D ^a . Rosario Carrasco Nicolás	C. Ayudante de Investigación de OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Purificación Díez Rodríguez	C. Gral. Admvo. Admon. del Estado / <i>General Admon.</i>
D ^a . Ana María García Arribas	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a . Carmen García Collado	C. Ayudante de Investigación OPIS / <i>Research Assistant OPIs</i>
D ^a Marta Garoz Morales	CFMAC- Funcionaria Interina – C. Admvo. <i>Admón. (desde 14 diciembre)</i>
D ^a . Beatriz Gil Sánchez	C. Gral. Admvo. Admón. del Estado / General <i>Admvo. Admon.</i>
D. Gabriel Marina Castellano	CFMAC- Contrato Formativo (desde 16 junio) <i>/ Training contract</i>
D ^a María Salinas Fernández	CFMAC- C. Gral. Admvo. Admón. del Estado <i>/ General Admon.</i>

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN
CENTRAL SERVICES

ALMACÉN / WAREHOUSE

D^a. Clara Isabel Cardeñosa García

C. Gral. Admvo. Admón. del Estado /
General Administration

D^a. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes /
Common Services Assistant

CONSERJERÍA / RECEPTION

D^a M^a Ángeles Castro de la Puente

Ayudante Gestión y Servicios Comunes /
Common Services Assistant

INFORMÁTICA / INFORMATICS AND COMPUTER SERVICES

D. Fco. Daniel Rincón Fuentes

Técnico Especializado de OPIS /
Technical Specialized OPIs

MANTENIMIENTO / MAINTENANCE

D. David Bravo Díaz

Funcionario Interino – C. Gestión Admón.
Estado (desde 15 diciembre)

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*

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.
- Física Nuclear Teórica: Estructura y Reacciones.
- Física Molecular Teórica aplicada al estudio de especies astrofísicas y a la caracterización de contaminantes atmosféricos.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Cosmología Cuántica de Lazos (Loops).
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Física de agujeros negros.
- Gravedad cuántica no-local.
- Ondas gravitacionales.
- Teoría clásica y cuántica de campos.
- Sistemas mesoscópicos y fuertemente correlacionados.
- Procesos electrodébiles en el núcleo.
- Estructura nuclear con métodos autoconsistentes de campo medio correlacionado.
- Técnicas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones de interés en Astrofísica Nuclear.
- Espectroscopia teórica de especies moleculares no-rígidas de interés astrofísico y atmosférico.
- Formación de compuestos orgánicos volátiles a partir de radicales orgánicos.
- Fotodisociación de radicales orgánicos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.
- Teoría de campos perturbativa.
- Métodos geométricos en el formalismo hamiltoniano de teorías de campos.
- Métodos de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas.
- Desarrollo adiabático en armónicos hiperesféricos.
- Métodos ab initio altamente correlacionados y nuevas herramientas computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

GRAVITACIÓN Y COSMOLOGÍA

Cosmología Cuántica de Lazos

El Grupo de Gravitación y Cosmología del IEM ha contribuido con investigaciones innovadoras al avance de la Cosmología Cuántica de Bucles. Hemos obtenido resultados en dos frentes: predicciones para el espectro primordial de perturbaciones cosmológicas y una descripción cuántica de espaciotiempos de agujeros negros.

Con respecto a las perturbaciones cosmológicas, hemos obtenido impresionantes aproximaciones analíticas al espectro de potencia primordial tanto para perturbaciones tensoriales como escalares. Estas aproximaciones se han alcanzado utilizando nuestra propuesta para la elección de un estado de vacío para las perturbaciones. Esta propuesta selecciona el estado más natural en Cosmología Cuántica de Lazos, bien adaptado a la evolución cosmológica, sin oscilaciones artificiales superpuestas que bombearían potencia al espectro. Este vacío no oscilante presenta una escala física del orden de Planck en torno al rebote que se produce en Cosmología Cuántica de Lazos, pero que luego evoluciona como el resto de longitudes de onda físicas. Hemos comprobado que las aproximaciones analíticas dan buenos ajustes a los resultados numéricos. El principal efecto físico del rebote cuántico es la supresión de potencia a grandes escalas angulares, hecho que alivia y/o resuelve las tensiones entre las observaciones cosmológicas y las predicciones del modelo cosmológico estándar frecuentemente usado en Relatividad General.

En el caso de los agujeros negros, hemos logrado la primera cuantización completa y consistente de la geometría interior de un modelo propuesto recientemente en Cosmología Cuántica de Lazos para incorporar de manera efectiva efectos cuánticos sin modificar significativamente el entorno del horizonte, pero curando la singularidad esencial. Nuestra cuantización elige un hábitat adecuado para las soluciones a la ligadura hamiltoniana y, con ello, proporciona un espectro continuo de masa de agujero negro en el sector físico. Para desarrollar un formalismo perturbativo en torno a estos agujeros negros cuánticos, hemos discutido la introducción de un campo escalar lineal e investigado cómo llegar a una teoría cuántica de campos bien definida en la que el concepto de vacío y partícula esté fijado por criterios físicos razonables. Hemos demostrado que puede lograrse imponiendo que, una vez que se separa una parte de la evolución del campo atribuyéndola al fondo, la dinámica de Heisenberg resultante se pueda implementar como una transformación cuántica unitaria. De esta manera, se puede seleccionar una cuantización privilegiada del campo. Planeamos combinar nuestros resultados para obtener un modelo cuántico que podría usarse para describir radiación gravitacional emitida por agujeros negros, con conexiones con la astrofísica de ondas gravitacionales.

Gravedad cuántica no-local

Una de las actividades principales del grupo de Gravitación y Cosmología es el estudio de teorías cuánticas perturbativas de la interacción gravitacional. En general, los modelos más tradicionales locales con derivadas de orden superior no son unitarios, pero mostramos que hay una excepción notable a esta regla, es decir, cuando los modos fantasmas están apareados en polos complejos conjugados. En este caso, dichos modos no aparecen en el espectro físico de la teoría. Por otro lado, la presencia de operadores no-locales en la acción de campo permite resolver el problema de la unitariedad eliminando los modos fantasmas por completo

o reduciéndolos a partículas puramente virtuales. En 2023, hemos obtenido pocos resultados en esta línea de investigación, pero de elevada calidad. En el caso de la gravedad cuántica no-local con operadores asintóticamente polinomiales, hemos formulado una versión no minimalmente acoplada de gravedad-materia y demostrado en detalle su súper-renormalizabilidad o finitud. Cuando es finita, esta teoría es invariante bajo la simetría de Weyl a nivel tanto clásico como cuántico. Estamos explorando las consecuencias fenomenológicas de esta propiedad. Por otro lado, hemos finalmente llegado a una formulación de una gravedad cuántica perturbativa con operadores fraccionarios, buscada desde 2010 y motivada completamente en términos de propiedades geométricas del espaciotiempo asociadas con un buen comportamiento en la ultravioleta. La teoría resulta ser súper-renormalizable o incluso finita y, además, es unitaria al menos a nivel árbol. Los modos físicos no son partículas puntiformes (propagadores con polos), sino gases de cuasi-partículas (propagadores con cortes de rama). En la actualidad, estamos estudiando las consecuencias cosmológicas de la teoría.

Ondas gravitacionales

El grupo de Gravitación y Cosmología es uno de los grupos externos del Consorcio LISA y cuenta con un miembro pleno y uno asociado, más un asociado externo. El 2023 ha sido caracterizado por el cierre de la llamada fase B1 según la nomenclatura ESA y la definición de los objetivos científicos definitivos de la misión. Hemos contribuido a este esfuerzo con un “artículo blanco” del Grupo de Trabajo de Cosmología, que ya ha recibido más de 200 citas. Nuestra aportación se centró en el fondo estocástico de ondas gravitacionales de origen cosmológica y sobre la capacidad de LISA de detectar huellas de gravedad más allá de la teoría de Einstein. La muy reciente adopción de LISA por parte de la ESA y su entrada en la fase B2 de implementación marcará un incremento de las actividades del grupo en este sector. En paralelo, como miembros del Telescopio Einstein (ET), hemos llevado al cabo un estudio independiente del modelo sobre la posibilidad de detectar oscilaciones logarítmicas en el fondo de ondas gravitaciones tanto con ET como con LISA y DECIGO. Dichas oscilaciones pueden tener varios orígenes, entre las cuales destacamos una simetría discreta de la geometría del espaciotiempo que puede emerger en escenarios de gravedad cuántica. Estos resultados formarán parte del Libro Azul de ET, actualmente en fase de redacción.

Métodos geométricos en gravitación

Entre las actividades realizadas por el Grupo de Gravitación y Cosmología en el estudio de los aspectos matemáticos de la formulación hamiltoniana de las teorías de campos, en particular la gravedad, durante este año hemos completado el estudio riguroso de la acción autodual en el contexto del formalismo geométrico de Gotay-Nester-Hinds (GNH) y el estudio de cuestiones relacionadas con el análisis funcional para teorías de campos genéricas. El análisis hamiltoniano de la acción del autodual no es un caso particular del correspondiente a la acción de Holst debido a la aparición de degeneraciones asociadas con algunos operadores relevantes que se convierten en proyectores para ciertas elecciones del parámetro Immirzi (que se corresponden con la acción autodual o autodual, que forman parte de la familia uniparamétrica de acciones de Holst). Una consecuencia de esto es que no es posible adaptar el análisis hamiltoniano de la acción de Holst en cualquiera de sus variantes (es decir, utilizando los enfoques de Dirac o GNH) al caso autodual. Para ello hace falta un análisis completamente nuevo. Al llevarlo a cabo, el último paso en el proceso de probar la

consistencia del proceso de obtención de una subvariedad del espacio de fases en la que se pueda definir una dinámica consistente (tangencia de los campos vectoriales hamiltonianos a la subvariedad ligaduras secundarias) exige la introducción de métodos bastante sofisticados. Hemos resuelto este problema por completo y, como resultado adicional derivado del anterior, hemos encontrado un procedimiento de reducción explícito que da lugar a la formulación de Ahtekar para la gravedad sin fijaciones de gauge. Este resultado se publicará el próximo año.

Los detalles de la formulación de teorías de campos relacionados con el análisis funcional se han entendido desde hace bastante tiempo. Sin embargo, y a pesar de que estos resultados han sido conocidos por la comunidad matemática, no se han filtrado al ámbito de la física teórica. En muchos contextos son percibidos como una especie de letra pequeña necesaria para la rigORIZACIÓN de algunos problemas, pero carente de consecuencias físicas. En realidad, este es un punto de vista bastante paradójico porque las teorías de campos, y muy especialmente las teorías cuánticas de campos, están plagadas de inconsistencias matemáticas para las cuales hay algunas soluciones prácticas que no se entienden de manera satisfactoria. Incluso sistemas tan simples como el campo escalar libre no son triviales desde la perspectiva del análisis funcional. Por ejemplo, pese a las primeras apariencias, son sistemas singulares y, por tanto, su descripción hamiltoniana no es trivial. Peor aún, no es posible utilizar el popular método de Dirac porque la subvariedad de ligaduras primarias (la imagen de la derivada de la fibra) es densa en el espacio de fases y, por tanto, no es posible representarla como el conjunto nulo de ninguna función continua. Durante el último año hemos adaptado el método GNH para afrontar esta situación y hemos obtenido una descripción detallada y rigurosa que tiene en cuenta todas las cuestiones funcionales relevantes. Nuestra esperanza es que esto nos permita cuantizar este modelo y sus perturbaciones sin encontrar problemas de regularización o renormalización. Recientemente hemos completado un artículo sobre este tema que se publicará durante 2024.

TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA

Orden nemático y de Kekulé en bicapas de grafeno giradas

Las bicapas de grafeno giradas muestran un comportamiento distintivo, que en el caso de su superconductividad se ve reflejado en propiedades de nematicidad que están ausentes en las tricapas, cuatricapas y pentacapas giradas. Además, la superconductividad de las bicapas giradas puede coexistir con fases metálicas o aislantes, dependiendo del apantallamiento externo. Así, durante este último año hemos estado trabajando para conseguir un mapa detallado del diagrama de fases de las bicapas giradas, que muestra gran complejidad como reflejo de la sensibilidad del material frente a pequeños cambios en las condiciones experimentales. En una primera etapa, hemos aprovechado el hecho de que la aplicación de presión hidrostática en las bicapas giradas puede inducir la aparición de bandas planas para ángulos de giro mayores que el valor habitual del ángulo mágico. Hemos caracterizado las fases emergentes para factores enteros pares de llenado, empleando un esquema de cálculo auto-consistente exacto de Hartree-Fock en espacio real que puede tener en cuenta tanto la interacción de largo alcance de Coulomb apantallada como la interacción local de Hubbard. Hemos completado nuestra resolución en espacio real con la evaluación de los parámetros de orden que definen las fases con polarización de valle y coherencia entre valles, que son las principales candidatas para explicar las fases observadas experimentalmente.

Hemos buscado evidencias de nematicidad en las bicapas giradas bajo presión, donde el número de átomos en la celda unidad de muaré se ve muy reducido (hasta ~ 1000 átomos). En estas condiciones, la resolución auto-consistente de Hartree-Fock se puede realizar de manera exacta, incluyendo todas las bandas del modelo. Hemos visto que, para un cierto rango de acoplos en el régimen de dopado con huecos, las bicapas giradas muestran una fase con ruptura de la invariancia de rotación C_3 que se ve reducida a una simple simetría especular. Esta es consistente con la nematicidad observada por el grupo de Pablo Jarillo en MIT, lo que puede arrojar luz sobre las condiciones de apantallamiento que conducen a esta peculiar propiedad en las bicapas giradas. Además, hemos visto también que hay complementariedad entre la fase nemática, que reposa siempre en un estado con polarización de valle, y un régimen diferente con orden de densidad de carga de Kekulé, que es una señal de la coherencia de valle. Estos resultados son relevantes para reconciliar las observaciones de nematicidad con experimentos recientes de microscopía de efecto túnel, que han revelado la presencia de orden de Kekulé en otras configuraciones de las bicapas giradas en el ángulo mágico.

Nuestra meta es llevar a cabo la identificación de propiedades similares, pero en las bicapas giradas habituales, donde el número de átomos en la celda unidad de muaré es $\sim 10,000$. A tal fin, hemos puesto a punto una resolución auto-consistente de Hartree-Fock que hace uso intensivo de técnicas de paralelización, lo que permitirá una aplicación exacta del método de Hartree-Fock incluyendo todas las bandas del modelo. Esto puede requerir grandes recursos computacionales, exigidos para poder ejecutar códigos con hasta 1 TB de RAM, en un esfuerzo por clarificar definitivamente la naturaleza de la nematicidad y el origen de la superconductividad en las bicapas de grafeno giradas.

Ingeniería de Floquet

La posibilidad de controlar propiedades físicas mediante un campo periódico externo ha llevado al desarrollo del concepto de ingeniería de Floquet donde los parámetros de un sistema cuántico son modulados por un campo externo. La ingeniería de Floquet ha sido implementada con éxito en átomos ultrafríos, donde la modulación es inducida por las vibraciones de la red óptica que contiene a los átomos. Realizar la técnica de Floquet en sistemas de estado sólido es muy desafiante pero prometedor. De forma más específica, la posibilidad de hacer ingeniería de Floquet de sistemas topológicos se ha convertido en una manera muy prometedora de controlar las propiedades topológicas de los materiales cuánticos. En este caso, la modulación se realiza mediante radiación electromagnética externa, y para alcanzar las amplitudes requeridas, se usan pulsos láseres ultracortos. La teoría de Floquet requiere una periodicidad temporal estricta y el concepto de control de Floquet se ha puesto en duda. Estudiamos la fidelidad de Floquet de electrones de Dirac sometidos a luz lineal y circularmente polarizada. Aplicamos nuestros resultados a los estados de superficie del Bi_2Se_3 incluyendo la deformación trigonal. Incluso con pulsos muy cortos que duran solamente unos pocos ciclos encontramos fidelidades de Floquet muy altas que apuntan a la posibilidad del uso de pulsos cortos para realizar ingeniería de Floquet efectiva.

FÍSICA NUCLEAR TEÓRICA

Dispersión de electrones por núcleos polarizados

La dispersión elástica de electrones por núcleos impares axialmente deformados y polarizados se ha estudiado en la aproximación de Born de ondas planas con estructura nuclear descrita mediante una aproximación microscópica autoconsistente de Hartree-Fock deformada con interacciones de Skyrme y correlaciones de tipo pairing. En este estudio se muestra que los factores de forma de interferencia entre los términos de Coulomb monopolar (C0) y cuadrupolar (C2) que caracterizan la respuesta nuclear de la dispersión elástica de electrones por blancos polarizados, aumentan o disminuyen la sección transversal no polarizada, dependiendo del signo de la deformación cuadrupolar.

Explorando experimentalmente el efecto de esta respuesta nuclear se puede obtener información sobre el signo de la deformación nuclear que resulta ser todavía muy escasa. Para ilustrar la magnitud potencial de esos efectos, se presentan casos específicos con diferentes espines y paridades del estado fundamental del núcleo blanco y con diferentes tipos de deformación. Es concreto se estudian los casos de ^{23}Na ($I\pi=3/2+$), ^{25}Mg ($I\pi=5/2+$) y ^{59}Co ($I\pi=7/2-$). El punto a resaltar es que las mediciones conjuntas de las secciones eficaces polarizadas y no polarizadas permiten obtener una indicación independiente del modelo del carácter de deformación achatada o alargada de la forma nuclear. Esta información se basa en la simple observación de si la sección eficaz aumenta o disminuye al polarizar el núcleo. La magnitud de esta desviación está relacionada con la magnitud de la deformación cuadrupolar de una forma que depende del modelo nuclear específico considerado. No obstante, las aproximaciones realizadas en este estudio no cambian las conclusiones sobre la viabilidad de obtener observables que muestren sensibilidad a la interferencia C0/C2 y, por tanto, al signo de la deformación axial en núcleos impares. El espín nuclear en los procesos de dispersión de electrones determina el número de multipolos que contribuyen al factor de forma total. Si bien el foco principal de este trabajo se centra en la interferencia C0/C2, una investigación más amplia que considere las multipolaridades más altas permitidas por el espín nuclear puede revelar interferencias adicionales. Además, el espín nuclear también determina en gran medida la magnitud de los factores geométricos que dictan los pesos de las contribuciones de interferencia al factor de forma total. Por el contrario, la paridad del estado nuclear no tiene una influencia significativa en este contexto. El estudio abarca también núcleos con diferentes números atómicos y másicos. Estos números juegan un papel importante a la hora de determinar el tamaño nuclear y, específicamente, el radio de la carga nuclear que presenta una correlación directa con el primer mínimo de la sección eficaz, sufriendo una compresión al aumentar el radio. Investigaciones futuras deberían abordar otros aspectos importantes, incluyendo reacciones inelásticas, los efectos de utilizar electrones polarizados y el impacto de la distorsión de Coulomb del electrón en la sección eficaz.

Confinamiento de sistemas de dos y tres partículas por medio de un campo externo

A lo largo de este año hemos utilizado el denominado “d-method”, recientemente desarrollado, y que permite investigar sistemas de dos y tres cuerpos bajo la influencia de un potencial de confinamiento externo. El punto de partida de este procedimiento consiste en tomar la dimensión d como un parámetro que puede variar de forma continua desde $d=3$ hasta $d=2$. El efecto del potencial de confinamiento queda entonces contenido en la barrera

centrífuga de potencial, que presenta una dependencia en la dimensión. Este método es preciso y correcto en los dos límites, es decir, para $d=3$ y $d=2$.

En particular, para sistemas de dos cuerpos, hemos investigado funciones de onda, defasajes y secciones eficaces elásticas. La interacción entre los dos cuerpos se ha tomado de corto alcance. Usando un potencial de pozo cuadrado, hemos derivado expresiones analíticas para longitudes de dispersión y defasajes. Hemos introducido también la dimensión crítica, d_E , que se corresponde con el escenario en el que la longitud de dispersión de la interacción es infinita. Esta situación es particularmente interesante, ya que, cuando se añade una tercera partícula, se cumplen las condiciones para la aparición de estados de Efimov. Hemos investigado también la equivalencia entre las funciones de onda obtenidas en el espacio de dimensión d y la correspondiente al espacio tridimensional ordinario confinado. Hemos demostrado que los defasajes son los mismos en ambos casos. En consecuencia, el método d se puede utilizar para obtener secciones eficaces elásticas de dos cuerpos a baja energía ante la presencia de un campo externo.

Siguiendo el mismo esquema, hemos investigado también el caso de los sistemas de tres cuerpos, centrándonos en estructuras en el continuo de tres partículas que interactúan en un campo externo deformado. Nos enfocamos en dimensiones cercanas a la dimensión crítica, $d = d_E$, entre 2 y 3, para la cual la energía de los subsistemas de dos cuerpos es igual a cero. Estas son de nuevo las condiciones bajo las cuales puede aparecer el efecto Efimov. En este escenario, $d=d_E$, hemos diseñado un modelo de tres cuerpos esquemático, realista a largas distancias, basado en potenciales de pozo cuadrado para la interacción partícula-partícula. Así, hemos derivado expresiones analíticas para las funciones de onda, longitudes de dispersión, defasajes y secciones eficaces elásticas. El procedimiento y los resultados son universales, válidos para todos los potenciales de corto alcance siempre que las longitudes de dispersión suficientemente grandes. Hemos discutido también las propiedades y la validez de las expresiones derivadas considerando el sistema más simple, como es el de tres bosones idénticos. Hemos encontrado que las expresiones encontradas son particularmente útiles para energías muy pequeñas, donde los cálculos numéricos completos a menudo no son factibles. Para energías en las que se pueden realizar cálculos numéricos, se encuentra una buena concordancia con los resultados analíticos. Estos resultados del modelo pueden probarse mediante experimentos de dispersión para tres partículas en un potencial de oscilador deformado externo equivalente. Todas las secciones eficaces van a cero en el límite de energía cero para $d < 3$ como una potencia de la energía dependiente de d .

Desintegración beta en núcleos con halo de dos neutrones

A lo largo de este año hemos investigado también la desintegración beta de núcleos con halo de dos neutrones. Más concretamente, hemos desarrollado un método de pocos cuerpos novedoso y práctico que está formulado para incluir simetría de isospín. El método está diseñado para describir la desintegración beta, donde el concepto básico de simetría de isospín facilita una comprensión adecuada. Se tratan tanto los estados isobáricos análogos como los anti-análogos. Hemos derivado fórmulas generales y explícitas para sistemas de tres cuerpos usando coordenadas hiperesféricas. La desintegración beta del ^{11}Li ($^9\text{Li}+n+n$) se toma como primera aplicación, ya que tiene un gran interés práctico, al existir ya datos experimentales acerca de la misma. Los resultados detallados se comparan con los datos experimentales existentes y se encuentra una buena concordancia a altas energías, donde están situados los estados isobárico análogo y anti-análogo en el núcleo hijo. Se sugiere una

interpretación del patrón de decaimiento a energías de excitación más bajas. Las desintegraciones del ${}^9\text{Li}$ y los dos neutrones del halo se tratan individualmente, llevando a un núcleo hijo con un isospín bien definido. Sin embargo, predecimos que los estados isobárico análogo y el anti-análogo pueden estar mezclados en un 0.4% aproximadamente. Las propiedades predichas para los productos de la desintegración pueden constituir buenos tests futuros para el modelo aquí desarrollado.

FÍSICA MOLECULAR TEÓRICA APLICADA AL ESTUDIO DE ESPECIES ASTROFÍSICAS Y A LA CARACTERIZACIÓN DE CONTAMINANTES ATMOSFÉRICOS

La tarea de investigación realizada en 2023 se inserta en el proyecto H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 “Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)”. Este proyecto se coordina desde el instituto de Estructura de la Materia y desde el grupo de Química Teórica del Departamento de Química y Física Teóricas en colaboración con la Unidad Asociada con la Universidad de Huelva.

ATMOS es una red internacional financiada por una Acción Marie Curie para el intercambio de investigadores (RISE) del programa H2020. El objetivo principal es el estudio de problemas científicos relacionados con los elementos de contaminación atmosférica, con énfasis en la formación de estudiantes graduados en ciencias atmosféricas. La red está compuesta por doce grupos científicos y 31 científicos senior. Dentro de este entorno, varios estudiantes y profesores procedentes de los grupos integrados en ATMOS han visitado el IEM-CSIC. Durante el 2023, se incorporó a la red el grupo de la Universidad de Agadir, dirigido por S. Dalbouha, antigua doctoranda del IEM-CSIC.

ATMOS se centra en especies abundantes en la atmósfera, especies orgánicas volátiles oxigenadas (OVOC's) y radicales orgánicos. Básicamente, el trabajo científico de los participantes del IEM se refiere a la identificación y reactividad de los radicales orgánicos y de los OVOC's que presentan rotación interna. Se parte de la base de que la comprensión de los procesos que involucran compuestos orgánicos en la atmósfera depende de su identificación y caracterización. El modelado espectroscópico cuantitativo línea por línea en el rango infrarrojo (IR) es necesario para las observaciones atmosféricas actuales y futuras con instrumentos de gran escala. Para entender los efectos en la atmósfera, se necesitan parámetros estructurales y espectroscópicos. Estos estudios requieren un gran esfuerzo científico centrado en la caracterización de especies conocidas y nuevas y en el conocimiento de la evolución química, de los procesos fotoquímicos inducidos y los ciclos radicales. En el IEM, la herramienta principal para la caracterización molecular son los cálculos ab initio altamente correlacionados, así como los códigos Originales de Fortran para la determinación de propiedades espectroscópicas. Se colabora con los laboratorios del Departamento de Física Molecular.

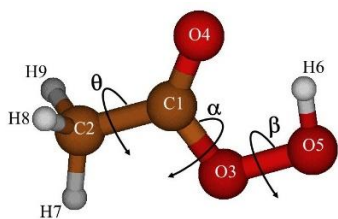


Fig 1

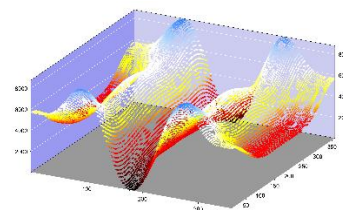


Fig 2

Son objetivo de ATMOS la espectroscopia, la reactividad y e interacciones gas-gas y gas-sólido que involucran contaminantes atmosféricos. Se aborda la modelización de sólidos moleculares para la captura y almacenaje de contaminantes. Durante 2023, se han estudiado procesos de absorción de nitrofenoles sobre carbón activo. Los nitrofenoles se producen en la combustión de fueles para motores.

Durante 2023, se han calculado propiedades espectroscópicas y estructurales, con un énfasis en la rotación interna de grupos metilo, de alcoholes, eteres y cetonas que están clasificadas como Compuestos Orgánicos Oxigenados Volátiles. Estas especies contribuyen a un incremento del O₃ troposférico. Se emplean cálculos ab initio altamente correlacionados y software original. Se han estudiado la acetona y el biacetilo y espectroscopia Raman. Esto último en colaboración con el departamento de Física Molecular. Teóricamente se han estudiado el alcohol isopropílico, el metoximetanol, la hidroxiacetona y algunos peróxidos (CH₃COOOH (Fig 1 y 2), CH₃OOCH₃). Algunas de estas especies volátiles, han sido detectads en fuentes gaseosas del medio interestelar.

DEPARTAMENTO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR, VIBRACIONAL Y DE MEDIOS DESORDENADOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Sistemas carentes de orden de largo alcance.
- Nano-Fotónica.
- Plasmónica y Metamateriales.
- Espectroscopía intensificada por superficies (SERS, SEF and SEIRA) de sistemas moleculares.
- Nanosensores.
- Técnicas espectroscópicas aplicadas al estudio de materiales de interés en el Patrimonio Cultural.
- Diseño de ecomateriales.
- Análisis toxicológico mediante técnicas espectroscópicas.
- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.
- Estudio de hiper-materia exótica, núcleos mesónicos y otros estados ligados dentro sección extraña de la ecuación de estado nuclear.
- Métodos de seguimiento de partículas y vértices.
- Investigación sobre machine learning and deep learning a la espectroscopia nuclear experimental.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot y Geant4 para experimentos de Física Nuclear energía bajas, medias y relativistas.
- I+D en detectores para experimentos e Instrumentación.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Estructura y dinámica microscópica de materia condensada desordenada.
- Resonancias plasmónicas y de Mie en nanoestructuras metálicas/dieléctricas (nanoantenas).
- Metasuperficies con materiales dieléctricos de alto-índice: estados ligados en el continuo.
- Plasmónica topológica.
- Nanofabricación y funcionalización de nanoestructuras plasmónicas.
- Caracterización de biomoléculas adsorbidas en nanoestructuras mediante espectroscopías asistidas por plasmones.
- Detección de contaminantes mediante SERS.
- Análisis de colorantes y pigmentos mediante espectroscopía vibracional convencional y espectroscopías vibracionales intensificadas por superficie.
- Cálculos teóricos de espectros vibracionales.
- Estudios in situ de caracterización de materiales.
- Cementos sostenibles.
- Patrimonio subacuático.
- Física Nuclear Experimental.
- Estudio de estados nucleares excitados y resonantes.

- Estudio de hiper-materia exótica, núcleos mesónicos y otros estados ligados dentro sección extraña de la ecuación de estado nuclear.
- Métodos de seguimiento de partículas y vértices.
- Investigación sobre machine learning and deep learning a la espectroscopia nuclear experimental.
- Simulaciones por computación usando la herramienta FairRoot y Geant4 para experimentos de Física Nuclear energía bajas, medias y relativistas.
- I+D en detectores para experimentos e Instrumentación.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Métodos computacionales.
- Simulación Numérica.
- Dispersión de neutrones.
- Medidas de Adsorción de gases.
- Física Teórica y Matemática.
- Espectroscopía Raman Dispersiva
- Espectroscopía Raman por Transformada de Fourier (FT-Raman)
- Espectroscopía Raman portátil
- Espectroscopía IR por transformada de Fourier (FTIR)
- Reflectancia total atenuada de infrarrojo (ATR)
- Espectroscopía de Fluorescencia
- Fluorescencia de Rayos X (XRF)
- Difracción de Rayos X (DRX)
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM)
- Microscopía electrónica de barrido (SEM)
- Fluorescencia de rayos X por energía dispersiva (EDX)
- Microscopía óptica (MO)
- Microscopía de Campo Oscuro (DFM)
- Análisis térmico (ATD/TG)
- Resonancia Magnética Nuclear (RMN)
- Desintegración beta de núcleos exóticos producidos por el método ISOL en la instalación ISOLDE.
- Reacciones a baja energía en el acelerador de 5MV CMAM@UAM.
- Reacciones a energías relativistas en el experimento R3B@GSI, FRS@GSI.
- Simulaciones de Montecarlo utilizando el código GEANT4.
- Espectroscopía Gamma.
- Análisis de experimentos en Física Nuclear Experimental.
- Espectroscopía de hipernúcleos en colisiones de iones, con haz de mesones y emulsión nuclear.
- Algoritmos de reconstrucción de trayectorias y vértices.
- Arquitecturas de aprendizaje profundo de Pytorch para trayectoria de partículas, y análisis de datos.

LABOR INVESTIGADORA:

COMPORTAMIENTO FÍSICO A NANO-ESCALAS

Dentro de nuestras investigaciones sobre la adsorción de hidrógeno molecular a temperaturas criogénicas, en 2023 hemos seguido avanzando en el estudio experimental y análisis teórico de comportamientos metaestables en la adsorción de hidrógeno. La aparición de metaestabilidad en la fisisorción de hidrógeno en materiales porosos, esto es, de histéresis en los ciclos de adsorción/desorción isoterma, no es un fenómeno habitual y en particular nunca se había observado en el caso de los materiales carbonosos. Los pocos casos reportados en el caso de carbonos nanoestructurados resultaron ser causados por algún tipo de quimisorción en las impurezas metálicas presentes en el material. Desde el punto de vista de su aplicación práctica para el almacenamiento y la gestión del hidrógeno la fisisorción es claramente preferible dada su baja barrera energética para liberar el hidrógeno. Por otro lado, la histéresis en sí, es muy interesante desde el punto de vista práctico dado que permitiría tanto unas presiones de trabajo menores para la misma carga (alta presión sólo durante la carga del combustible) como un mejor manejo de los flujos de calor en el sistema. En 2023 nos hemos centrado de nuevo en un material nanoestructurado compuesto principalmente de haces de nanotubos de carbono de doble capa. Más concretamente hemos completado un primer artículo científico en el que se expone el comportamiento metaestable de la adsorción de hidrógeno y se lleva a cabo un estudio tanto estructural del sistema como de la dinámica microscópica de los procesos involucrados utilizando técnicas de dispersión de neutrones (publicación aceptada en la revista Carbon). Así mismo, hemos avanzado en el análisis de otra batería de medidas de dispersión de neutrones que revelan una histéresis estructural en el material adsorbente asociada a la histéresis en la adsorción de hidrógeno. Estamos también profundizando en el entendimiento del fenómeno a nivel microscópico mediante confrontación de las medidas con experimentos numéricos. Estos estudios se están llevando a cabo dentro de una nueva colaboración con el grupo de investigación Quantum Beams and Sustainable Materials dirigido por el Prof. Felix Fernández Alonso del Materials Physics Center en San Sebastian.

Dentro de la colaboración con el grupo de la Prof. Leonor Chico en la Universidad Complutense, hemos completado un artículo (publicado en la revista Carbon) sobre la sorprendente estructura electrónica de nanotubos de carbono de capa simple en su estado colapsado. Con anterioridad habíamos demostrado que una clase de dichos sistemas representan un ejemplo particularmente útil de lo que se conoce como super redes de Moire unidimensionales presentando todas las características de su homólogo bidimensional, las celebradas bicapas de grafeno rotadas (twisted bilayer graphene, TBG). En el artículo publicado se exponen como el comportamiento electrónico anómalo característico de los TBGs se da en todo tipo de nanotubos colapsados ya sean metálicos o semiconductores.

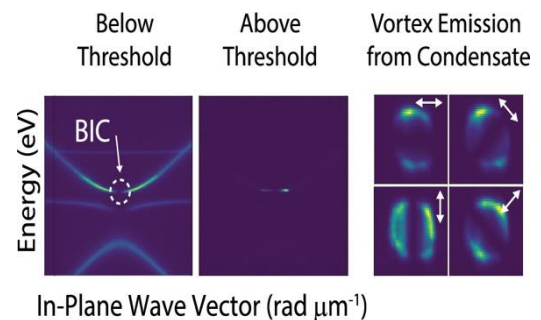
Por otro lado, las super redes de Moire unidimensionales en estos nanotubos aplastados conllevan una super red de acumulación de carga electrónica (eventualmente de electrones “congelados” en los nanotubos de quiralidades adecuadas) en las “islas” del patrón de Moire. La adsorción de hidrógeno molecular se ve fuertemente influida por los excesos de carga. En particular, las zonas con exceso de carga positiva incrementan fuertemente la adsorción como se comprueba en los intercalados de grafito con potasio. Dado que los patrones de moire de carga aparecen en cualquier tipo de nanotubo aplastado, hemos iniciado una línea de investigación de nuevo en colaboración con el grupo del Prof. Felix Fernández sobre las

consecuencias que estas super redes de carga pueden tener sobre la fisisorción de hydrogeno en nanotubos de carbono colapsados.

PROPIEDADES ÓPTICAS DE METASUPERFICIES: ESTADOS LIGADOS EN EL CONTINUO

Hemos continuado nuestro trabajo en curso sobre matrices periódicas planares (metasuperficies) de estructuras resonantes dieléctricas y plasmónicas de sub-longitud de onda con especial énfasis en los estados límite en el continuo (BICs). Los BIC han despertado mucho interés últimamente en fotónica por su factor Q (teóricamente) infinito. Estos estados son modos con fugas que, en un cierto límite de algún espacio de parámetros, no pueden acoplarse a ningún canal de radiación. Con el fin de atrapar la luz en estos modos electromagnéticos de ancho de línea casi cero, un enfoque común consiste en explotar metasuperficies: los canales especulares salientes pueden suprimirse ajustando los parámetros del sistema de diversas maneras, lo que conduce a BIC protegidos por simetría. Sobre la base de una teoría generalizada de dipolos eléctricos/magnéticos acoplados para matrices infinitas, se ha investigado una variedad de escenarios en los que los metaátomos simples/dobles pueden describirse simplemente mediante una combinación de varios dipolos eléctricos y/o magnéticos. Nuestro trabajo teórico se ha desarrollado en el marco de los proyectos MICIN BICPLAN6G & LIGHTCOMPAS. En esta línea, hemos contribuido con:

- Primera demostración experimental de la condensación excitón-polaritón (EP) a temperatura ambiente a partir de un BIC, lograda mediante el acoplamiento fuerte de excitones estables en un colorante orgánico de perileno con el BIC cuadrupolar de vida extremadamente larga en una metasuperficie dieléctrica de nanopartículas de Si, caracterizado mediante nuestros cálculos. La larga vida del BIC, debida principalmente a la supresión de la fuga de radiación, permite la termalización del EP al estado fundamental antes de decaer. Esta propiedad da lugar a un umbral de condensación 1 orden de magnitud inferior al umbral de láser reportado en sistemas similares en el límite de acoplamiento débil. En colaboración con los grupos de Sunshuke Murai (Kyoto University) & Jaime Gómez Rivas (Surface Photonics, Technical University of Eindhoven).



- Primera evidencia experimental de un fuerte confinamiento del campo electromagnético a lo largo de la dirección lateral (fuera del plano) en una metasuperficie casi sin pérdidas que soporta un BIC, que suprime totalmente las pérdidas radiativas de las aptícluas resonantes. Esta demostración experimental, apoyada por nuestros cálculos de dipolos acoplados, fue llevada a cabo por el grupo de Jaime Gómez Rivas (Surface Photonics, Technical University of Eindhoven).

NANOFOTÓNICA TOPOLÓGICA

En los últimos años ha habido múltiples propuestas en nanofotónica para imitar sistemas topológicos de materia condensada. Sin embargo, las nanopartículas tienen grados de libertad de los que carecen los átomos, como las dimensiones o la forma, que pueden aprovecharse para explorar la topología más allá de la electrónica. Las nanopartículas elongadas pueden actuar como proyectores del campo eléctrico en la dirección



del eje mayor. Al orientarlas en una red periódica, se puede ajustar el acoplamiento entre ellas, lo que permite abrir un gap en un sistema que, de otro modo, carecería de él. Como prueba del potencial uso de la orientación de las nanopartículas para la topología, estudiamos cadenas 1D de nanopartículas esferoidales proladas de plata. Demostramos que en estas matrices la modulación espacial de la polarización permite abrir gaps, diseñar simetrías cristalinas ocultas y activar/desactivar estados de borde a izquierda/derecha en función de la polarización del campo eléctrico incidente. Esto abre una vía hacia la explotación de las características topológicas de las nanopartículas para ir más allá de los análogos de los sistemas de materia condensada.

DISEÑO DE NANOSENSORES PARA DETECCIÓN DE CONTAMINANTES

El diseño de sensores con nanoestructuras ha continuado como uno de los principales objetivos del trabajo experimental de nuestro grupo durante el año 2023. Estos sensores requieren la síntesis de nanoestructuras con propiedades ópticas avanzadas. La interacción de luz de una longitud de onda apropiada con nanopartículas (NPs) conduce a una alta intensificación del campo eléctrico local, que es el principio fundamental en el que se basa la detección molecular mediante Raman y fluorescencia intensificada por nanoestructuras. En los últimos años hemos desarrollado diversos métodos de síntesis de nanopartículas con interesantes aplicaciones en espectroscopía y catálisis. Entre estas nanopartículas se encuentran las nanoestrellas de plata, sistemas éstos que presentan propiedades morfológicas específicas conducentes a altas intensificaciones del campo electromagnético. El uso de estas nanoestrellas se ha generalizado para el diseño de sensores SERS altamente eficaces para la detección de numerosas sustancias de interés medioambiental y biológico, así como pigmentos de interés para el Patrimonio Cultural.

Asimismo, el diseño de nanosensores implica una modificación de las propiedades físico-químicas de las nanopartículas mediante la funcionalización de las mismas. Esta funcionalización puede conseguirse mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas sobre las nanoestructuras, lo que permite incrementar la sensibilidad y selectividad de las nanoestructuras fabricadas, dando como resultado superficies de alto rendimiento al combinar las propiedades físicas del metal con las propiedades químicas de moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellas. En este sentido, se aplicaron diversas estrategias de funcionalización basadas en el uso de: a) calixarenos; b) ciclodextrinas y c) moléculas con estructura cruciforme.

Los calixarenos se caracterizan por poseer una cavidad interna dentro de la cual se pueden alojar moléculas difíciles de detectar por espectroscopía Raman intensificada por nanoestructuras (SERS). Durante 2022 se continuó con el uso de nuevas generaciones de calixarenos caracterizadas por presentar en su estructura diferentes puntos de unión con las

superficies metálicas. Estos nuevos ensambladores se probaron en la detección de contaminantes emergentes como glifosato, compuestos perfluorados y otros insecticidas neonicotinoides con efectos devastadores para la población de abejas como son thiacloprid, imidacloprid, acetamiprid y clorotalonil. Estos estudios se realizaron en el marco de la cooperación que nuestro grupo mantiene con investigadores de la Universidad PJ Safarik de Kosice (Eslovaquia) y con la empresa Safra Photonics y con la Universidad Playa Ancha en Chile. Esta empresa ha licenciado la patente desarrollada por nuestro grupo en la detección de glifosato.

Las ciclodextrinas se han empleado en la funcionalización de nanopartículas para la detección de trazas de otro tipo de contaminantes emergentes como son los bisfenoles. Las ciclodextrinas empleadas a tal fin necesitan incorporar en su estructura grupos tioles (-SH) que permiten el anclaje de la macromolécula sobre la superficie del metal. Al igual que los calixarenos, estas moléculas presentan una cavidad interna con características diferentes que permiten la interacción con moléculas de difícil adsorción sobre metales.

Asimismo, se han desarrollado en nuestro grupo nuevas metodologías de fabricación de nanopartículas plasmónicas para ser empleadas en la detección de contaminantes emergentes del tipo fenoxi, tales como MCPA y 2,4-D, para los que una modificación de nanopartículas fabricadas con citrato mejora enormemente su aplicabilidad. Se ha visto que el citrato modifica la morfología de las nanopartículas de plata generando nanovarillas capaces de desplazar la resonancia del plasmón hacia longitudes de onda mayores.

EFFECTOS PLASMÓNICOS Y ANÁLISIS DE BIOMOLÉCULAS

La excitación de plasmones en metales nanoestructurados, fundamentalmente plata y oro, pueden ser empleados en el estudio de biomoléculas. Este tipo de análisis permite una caracterización de biomoléculas a concentraciones fisiológicas, lo que permite la caracterización de las mismas a concentraciones parecidas a los medios biológicos en donde éstas se encuentran.

Los efectos plasmónicos analizados han sido los siguientes: a) resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR); b) hibridación interpartícula de plasmones, manifestada a través de procesos de agregación de nanopartículas; y c) la intensificación de campo eléctrico inducida fundamentalmente en los puntos de máxima intensificación de campo localizados en espacios interpartículas o gaps, y en puntas generadas en nanopartículas de morfología anisotrópica. Este último efecto es el responsable del efecto SERS.

Estos efectos presentan una prometedora aplicación en el campo de la biofotónica. Durante el 2023 se han empleado diferentes sustratos metálicos para llevar a cabo el estudio de la adsorción de péptidos sobre nanopartículas. La adsorción de péptidos permite la biofuncionalización de superficies con el objetivo de diseñar sensores biológicos capaces de detectar la presencia de agentes patógenos.

Durante el año 2023 se ha continuado con la línea de investigación basada en el empleo de nanopartículas plasmónicas para el análisis de sistemas biológicos complejos. Se ha progresado en el estudio de líquenes y hongos de diferentes especies. Los primeros resultados son bastante prometedores en la aplicación de la técnica SERS en la identificación de diferentes tipos de especies fúngicas. Se ha avanzado en el estudio de moléculas polifenólicas existente en tejidos vegetales tales como las agallas de robles, sustancias éstas que serán empleadas en la biofuncionalización de nanopartículas con vistas a ser empleadas en detección molecular.

Una línea de investigación iniciada durante este año ha sido el desarrollo de sensores plasmónicos para la detección de compuestos orgánicos volátiles. Estos sensores implican el desarrollo de nanoestructuras que permiten la inmovilización y consiguiente detección de las moléculas gaseosas a bajas concentraciones.

En colaboración con el Instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja” se está llevando a cabo la identificación de los aditivos del cemento, mediante la utilización de diferentes nanopartículas de plata. En la actualidad se ha detectado la modificación estructural de un derivado del metilsulfonato, añadido como aditivo a un cemento portland. Es la primera vez que se identifican dichos compuestos en el sistema poroso, siendo resultados muy prometedores para los estudios de fabricación de materiales cementantes sostenibles, dentro de la línea de colaboración con el IETcc.

TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS APLICADAS AL ESTUDIO DEL PATRIMONIO CULTURAL

Durante el año 2023 se ha continuado con la investigación de las tintas ferrogálicas presentes en manuscritos antiguos con el fin de realizar una discriminación de los diferentes tipos de tintas empleadas en un mismo documento o documentos similares, en donde diferentes tintas empleadas por varias personas pueden ser analizadas. Los principales objetivos de este trabajo han sido: a) discriminación de tintas ferrogálicas en manuscritos escritos en la misma época mediante el uso de espectroscopía Raman, infrarroja y XRF; b) identificación y asignación de los marcadores espectrales Raman de escrituras similares y su correspondencia con la estructura química de los componentes; c) valoración del efecto del envejecimiento sobre las señales espectrales con el fin de encontrar marcadores espectrales temporales, que puedan contribuir a conocer la antigüedad aproximada de las escrituras y las posibles modificaciones posteriores que se realicen en los manuscritos a lo largo del tiempo. Este trabajo se está completando con la fabricación de tintas ferrogálicas en nuestro laboratorio siguiendo las recetas encontradas en manuscritos antiguos, para su posterior comparación con las tintas de manuscritos históricos.

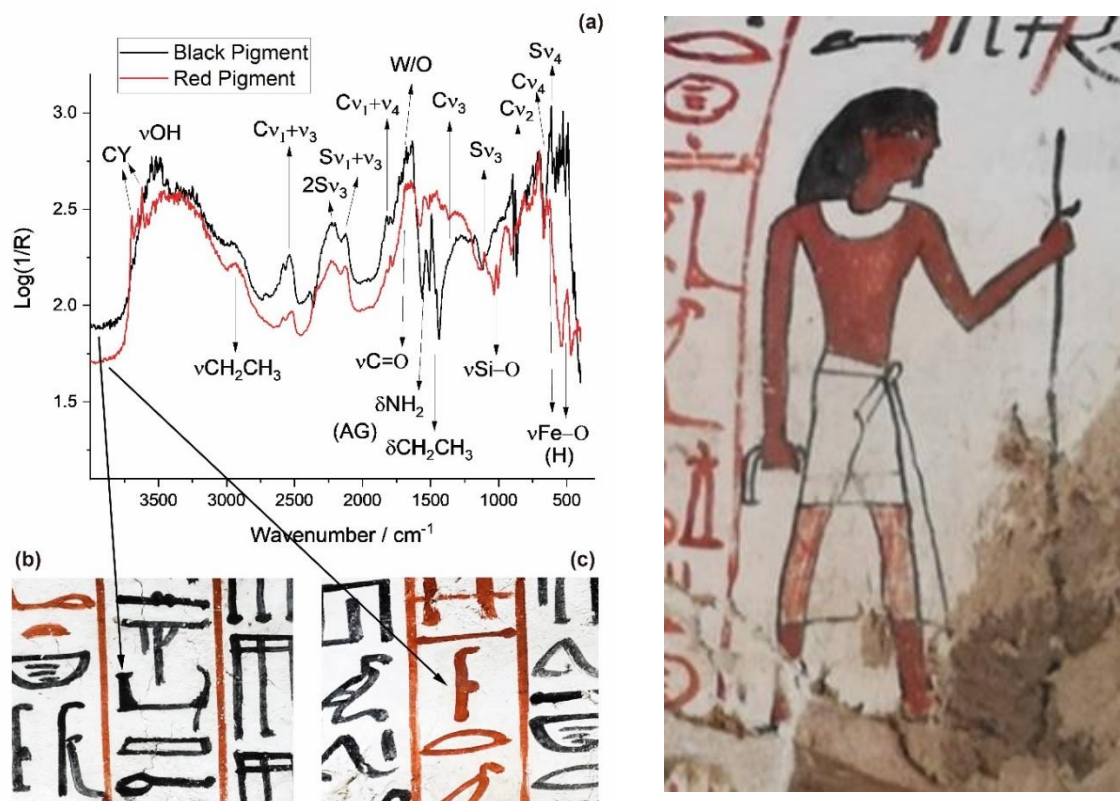
Durante este año se ha profundizado en el análisis de los complejos de hierro y cobre con diferentes sustancias polifenoles existentes en las tintas ferrogálicas, y se ha desarrollado un estudio teórico basado en el análisis de los modos vibracionales de diferentes complejos de hierro de estos polifenoles para ayudar en la interpretación de los espectros vibracionales de estas sustancias de gran importancia para el Patrimonio Cultural dada su presencia en manuscritos históricos. Los resultados resultantes de esta investigación, ayudarán al análisis de manuscritos históricos que se pretende realizar en un futuro en la Biblioteca Nacional de Madrid y la Biblioteca del Palacio Real de Madrid.

La aplicación de la espectroscopía Raman y FTIR en el análisis de materiales contenidos en tintas encontradas en cámaras funerarias egipcias ha sido otra de las tareas que se han desarrollado en nuestro grupo durante este año. Este tipo de estudio implica gran dificultad ya que ha de realizarse in-situ con instrumentación portátil capaz de ser introducida en la cámara funeraria. La espectroscopía Raman se ha empleado en el análisis de los pigmentos contenidos en esas tintas. Sin embargo, la presencia de un alto contenido de sustancias orgánicas en las mismas ha dificultado enormemente esta aplicación. La técnica DRIFT ha permitido la caracterización in-situ de estas tintas, si bien las señales más intensas provienen en este caso de los materiales dispersantes y aglutinantes. No obstante, los espectros DRIFT han proporcionado una importante información sobre el contenido de materiales como

calcita, yeso, cola animal, ceras, aceites. Estos materiales presentan diferentes señales en diferentes puntos que han permitido diferenciar la intervención de diferentes escribas en los paneles estudiados.

Durante el año 2023 se ha mantenido la colaboración con las universidades PUCMM y UNPHU de la República Dominicana, para el estudio de los morteros utilizados en los primeros asentamientos de Colón. Estos son los primeros trabajos de caracterización de los morteros colombinos en la República Dominicana y serán la base para el diseño de nuevos morteros con propiedades biocidas, para lo cual se tiene actualmente un proyecto de colaboración con la universidad UNPHU de la República Dominicana.

El estudio del Patrimonio sumergido y el efecto que los nanoplásticos tienen en su deterioro, es una línea que se está iniciando en el grupo gracias a la colaboración con el Centro de Humanidades y Ciencias Sociales del CSIC. Se han iniciado los trabajos estudiando mediante técnicas espectroscópicas (Raman y FTIR) el deterioro de algunas piezas cerámicas encontradas en pecios del siglo XVI.



DRIFT Spectra registered from the black and red inks encountered in the writings found in the walls of the Nakhtmin burial chamber in Sheikh abd el-Qurna, Luxor (Egypt)

Desarrollo de un prototipo de CT con protones: M.J.G. Borge, O. Tengblad, PhD A.N. Nerio, V. García, A. Perea y JF González Linares.

El grupo del IEM-CSIC dentro del Proyecto ASAP se encarga de la instrumentación de partículas cargadas y su electrónica asociada. Además de la simulación, diseño, construcción y prueba de detectores de rayos gamma y su electrónica asociada. En colaboración con el CMAM se propondrán experimentos para caracterizar la nueva fuente pulsada de iones que se compró en 2022 y que se recibirá en mayo del 2024. Mientras tanto las actividades del grupo se centran en el análisis y caracterización del prototipo de proton-CT para protonterapia.

El auge reciente de la terapia con protones ha mejorado significativamente el tratamiento del cáncer al reducir los efectos secundarios y así mejorar la calidad de vida de los pacientes mediante la optimización de la dosis al tumor y la minimización de la radiación en los tejidos sanos. La evolución de las técnicas de imagen médica, particularmente la transición de rayos X a la imagen con protones, es esencial para aprovechar al máximo la terapia con protones. Esta transición promete mejorar la precisión en la determinación del poder de frenado relativo (RSP, por su nombre en inglés) y reducir la exposición a la radiación en el diagnóstico y la planificación de tratamientos. Desde hace varios años, parte del trabajo que el Grupo de Física Nuclear ha derivado a este tema. Durante el 2023, se ha realizado avances en el análisis de los experimentos llevados a cabo en los dos años previos en el Centro de Ciclotrones de Bronowice (CCB) en Cracovia, Polonia. Se han obtenido las radiografías de varias muestras con patrones espaciales construidos en aluminio insertados en matrices de metacrilato de polimetilo (PMMA) en diferentes condiciones para evaluar el efecto de la dispersión múltiple de Coulomb en la generación de las imágenes. Además, en este experimento se evaluaron otros aspectos relevantes como la determinación de los RSP de diferentes materiales.

EURO-LAB (EU grant 101057511) M.J. G. Borge

M.J. G. Borge coordina el de actividades (WP5) dedicado a Open, Diverse and inclusive Science (Ciencia abierta, diversa e inclusiva)

El objetivo principal del proyecto es facilitar el acceso virtual y transnacional a una red de infraestructuras de investigación en los campos de la física nuclear y de la tecnología de aceleradores y detectores para la física de altas energías. Estas comunidades de investigación suelen trabajar con diferentes infraestructuras de investigación. La comunicación en oportunidades de intercambio son estratégicas para incrementar el uso de las instalaciones por parte de un mayor número de investigadores, con énfasis en los investigadores jóvenes. Las actividades de difusión del proyecto incluyen la producción de breves presentaciones en vídeo de las infraestructuras de investigación implicadas en el proyecto, creación de página web, boletín de noticias, etc. También abordamos en este WP5, como tarea 2, el diseño conceptual de un prototipo para el catálogo de física nuclear abierto que permita a las infraestructuras de investigación y a los investigadores centralizar los metadatos de sus datos de cada experimento. Esto fomentará mejores prácticas científicas siguiendo los principios FAIR hacia una ciencia abierta y efectiva en la comunidad. También les brinda la oportunidad de ver los conjuntos de datos por el resto de la comunidad científica y además que en un futuro puedan encontrarlos. Además, como tarea 3 aplicamos la técnica de aprendizaje automático para facilitar la optimización del haz de las diferentes instalaciones de forma que pueda ser optimizada por el propio usuario. Completamos este WP5 con la tarea 4 dedicada a cursos de formación práctica para jóvenes investigadores e ingenieros.

Desintegración beta como sonda del doblete de isospín 2^+ de ^8Be (María José García Borge, Olof Tengblad, PhD Daniel Fernández Ruiz)

La existencia de un doblete 2^+ de isospín en el ^8Be , constituido por sus estados excitados de 16.6 y 16.9 MeV, ha sido observada desde mediados de los años 60. Un aspecto intrigante de este doblete es que se asume que presenta una mezcla completa de isospín, donde estos niveles de 16.6 MeV ($^7\text{Li}+p$) y 16.9 MeV ($^7\text{Be}+n$) pueden ser descompuestos en una mezcla igual de dos niveles puros de isospín ($T=0$ y $T=1$). Aunque la estructura permite explicar los datos de los experimentos de reacción, una confirmación directa aún está pendiente. Como se explicó en informes previos, sostenemos que la desintegración beta del núcleo con halo de un protón, ^8B , en ^8Be es una herramienta valiosa para explorar la composición de isospín del doblete a través de los componentes Fermi y Gamow-Teller. La mayor parte de nuestro trabajo en esta línea de investigación se centra en superar el principal obstáculo para resolver la alimentación al doblete 2^+ a través de la desintegración β^+ : que es el bajo porcentaje de desintegración al doblete de isospín, siendo el modo de desintegración dominante (88%) un estado 2^+ muy ancho a 3 MeV. El experimento IS633, realizado en la estación IDS de CERN/ISOLDE, es el intento más reciente de nuestro grupo de investigar el doblete 2^+ de ^8Be a través de la desintegración EC/β^+ de ^8B . Un haz de $^8\text{BF}_2$ de 50 keV, separado por masa, fue implantado en un blanco de carbono de $30 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Cuando ^8B experimenta una desintegración EC/β^+ , poblando los estados excitados de ^8Be . Todos los estados excitados del ^8Be son no ligados y se descomponen en dos partículas α o un protón y un ^7Li , dependiendo del nivel poblado. Un sistema de telescopios de partículas detecta los fragmentos de descomposición. Nuestros resultados representan una mejora de dos órdenes de magnitud en estadísticas sobre el experimento de referencia anterior JYFL08, permitiendo la resolución del espectro continuo de ^8Be desde 1 MeV hasta 17 MeV. Los resultados preliminares de nuestro análisis han sido presentados en las siguientes conferencias: Conferencia Europea de Física Nuclear (EuNPC 2022); PROCON2023 (25-30 de junio de 2023); XXXVII Conferencia de los Lagos Mazurianos sobre Física (3-9 de septiembre de 2023); y Taller de ISOLDE y reunión de usuarios (29 de noviembre - 1 de diciembre de 2023).

Estudiando la estructura de ^{11}Li a través de reacciones de transferencia (Olof Tengblad, Ángel Perea, María José García Borge, Ph.D Daniel Fernández Ruiz)

El término "núcleo de halo" fue acuñado para describir núcleos que exhiben una extensión espacial inusualmente grande, desviándose de la fórmula estándar $r=r_0A^{1/3}$. La observación empírica inicial de este fenómeno surgió de experimentos de dispersión que involucraban, entre otros, isótopos de litio. Este descubrimiento llevó a la interpretación de un nuevo tipo de estructura nuclear, caracterizada por un núcleo compacto y un conjunto externo de nucleones. Entre los núcleos de halo, el isótopo ^{11}Li se considera el prototipo de halo de dos neutrones. El estado fundamental del ^{11}Li está muy bien caracterizado, sin embargo, no se puede decir lo mismo sobre la energía y el número de estados excitados a pesar de múltiples intentos. La mayoría de estos intentos se basan en excitar un núcleo ^{11}Li desde el estado fundamental a sus niveles más energéticos a través de reacciones. Estamos llevando a cabo un nuevo experimento para poblar los estados excitados de ^{11}Li a través de un método alternativo: utilizando la reacción $^9\text{Li}(t,p)^{11}\text{Li}$, ya que la estructura de ^9Li es más simple. El experimento, programado para 2024, tendrá lugar en la Cámara de Experimentos de Dispersión (SEC) en ISOLDE, CERN en Suiza. Nuestro sistema de detección está formada

por un objetivo central de tritio rodeado por un sistema de cinco telescopios de partículas (PAD+DSSD) formando un pentágono que rodea el objetivo por arriba, abajo y a los lados, para cubrir los ángulos hacia adelante y hacia atrás, el pentágono se complementa con un sistema de discos de silicio, un S3 en la parte trasera, junto con un telescopio S3-S5 en la parte delantera, cerrando el prisma y maximizando la cobertura angular. El blanco de tritio recibirá un haz de ${}^9\text{Li}$ con una energía de 7 MeV/núcleo, poblando la estructura excitada de ${}^{11}\text{Li}$ a través de la reacción ${}^9\text{Li}(t,p){}^{11}\text{Li}$, la información de los estados excitados se recopilará a partir del protón emitido que será detectado por nuestra configuración. Para procesar los datos, nuestro DAQ utiliza tarjetas digitalizadoras compactas (64 canales por tarjeta) desarrolladas por Mesytec, estas tarjetas realizan toda la lectura electrónica mientras solo requieren dos cables (enlace óptico y alimentación), lo que nos permite hacer que la configuración sea extremadamente compacta.

Proyecto MRR-HISTARS: O. Tengblad, M.J.G. Borge, A. Perea

(MICIN-MRR-NextgenerationEU CIE202301006)

El proyecto HIE-ISOLDE Timing Array for Reaction Studies (HISTARS), un detector de alta sensibilidad para medidas de vida media de estados excitados poblados en reacciones nucleares en HIE-ISOLDE, tiene como objetivo construir un conjunto de detectores rápidos para su uso en experimentos de reacciones de energía intermedia. El proyecto se divide en dos fases. El objetivo general es construir un detector de alta sensibilidad para las mediciones de la vida media de los estados excitados poblados en los estudios de reacción nuclear en HIE-ISOLDE. La fase 1 consiste en un único detector híbrido de respuesta rápida en ángulos frontales y dos anillos de centelleadores gamma alrededor de la cámara de reacción Miniball en la línea de haz 1 de HIE-ISOLDE. La fase 2 incluye un segundo detector de partículas y un tercer anillo de centelleadores. Los institutos españoles que participan en estos desarrollos son: Grupo de Física Nuclear, IPARCOS Fac. CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid (coordinador), IEM-CSIC, Madrid, IFIC, CSIC-UV, Valencia, Ciencias Integradas, UHU, Huelva, FAMN, Fac. CC Físicas, Universidad de Sevilla. El trabajo se realiza dentro de 8 paquetes de trabajo (WP): El WP1 está dedicado a la identificación de casos físicos que se beneficiarán de la configuración de HISTARS, tanto para la mejora de las capacidades de velocidad de conteo para estudios de reacciones que emplean reacciones de excitación y transferencia de Coulomb, como para la implementación de mediciones electrónicas de la vida útil utilizando métodos de temporización rápida. El objetivo del WP2 es la selección de centelleadores gamma de alto rendimiento para la sincronización rápida, basándose en las tecnologías existentes, la definición de la matriz de centelleadores externos (tipo, número y forma de los detectores) y su ubicación óptima. Se realizarán simulaciones de Monte Carlo para evaluar la mejor posición y la combinación óptima de detectores de germanio y centelleador para construir una matriz híbrida. El WP3 se ocupa de la selección de detectores óptimos con una respuesta de tiempo ultrarrápida para las mediciones de la vida media de los estados excitados poblados en los estudios de reacción nuclear en HIE-ISOLDE, con un enfoque específico en la detección e identificación de partículas con suficiente resolución temporal. El nuevo dispositivo debe combinarse o reemplazarse (parcialmente) los sistemas detectores de tiras de silicio existentes que se utilizaban para la detección del haz disperso y los núcleos objetivo en retroceso, sin perder las capacidades de resolución de ID y posición. Los cristales y fibras centelleadores acoplados a diferentes fotosensores se probarán en el laboratorio y se elegirá la tecnología más adecuada. El WP4 aborda el diseño y la construcción de la estructura mecánica para sostener los centelleadores gamma, y su

implementación e integración con el marco de soporte de Miniball existente. El WP5 se ocupa de la compra de cristales centelleadores gamma rápidos y fotosensores, el montaje y la integración, y las pruebas y el ajuste fino de los detectores. Una vez que se hayan realizado las pruebas, se montará una configuración fuera de línea de la matriz externa y se probará con la electrónica existente. Se caracterizará el conjunto y se evaluarán los parámetros básicos de rendimiento en relación con el tiempo y la energía de respuesta y eficiencia. WP6 se dedica a la compra de detectores rápidos de matriz de partículas, y al montaje y pruebas de detectores individuales. Se montará una matriz de prueba fuera de línea y se verificará con fuentes y electrónica estándar. Se caracterizará el conjunto interno y se evaluarán los parámetros básicos de rendimiento en relación con el tiempo y la energía, la respuesta y la eficiencia. El objetivo del WP7 es el montaje e integración del dispositivo completo, su acoplamiento a la electrónica front-end y la adquisición de datos, y las pruebas de rendimiento utilizando fuentes y haces estables de HIE-ISOLDE. El último WP8 trata de la puesta en marcha con haz radiactivo.

Proyecto MRR-ISRS: T. Kurtukian-Nieto, O. Tengblad, L. Acosta, M.J.G. Borge, A. Perea (MICIN-MRR-NextgenerationEU CIE2301005)

El ISRS (ISOLDE Recoil Separator) es un novedoso separador magnético de alta resolución que se instalará HIE-ISOLDE, la instalación de haces radioactivos de alta energía del CERN. El diseño del espectrómetro ISRS, a diferencia de los espectrómetros lineales de última generación que utilizan planos dispersivos, aprovecha el tiempo de vuelo de los fragmentos producidos en el blanco de la reacción para realizar la separación en masa. Al inyectar los fragmentos producidos en la reacción en un sistema de almacenamiento de partículas compuesto por una serie de imanes multifunción superconductores sin hierro, enfriados por crió-enfriadores e integrados en un mini-anillo de almacenamiento, es posible alcanzar resoluciones de 1/2000. El sistema diseñado actualmente es compacto, tiene 3,5 m de diámetro y un campo magnético relativamente bajo ($< 3T$) y es capaz de recircular con 100% de eficiencia un haz cóctel de isótopos de masa pesada (hasta $A=234$) a 10 MeV/u con una dispersión en momento del 30% y masas unitarias completamente separadas al funcionar en modo isócrono. Se ha desarrollado un prototipo de imán de 90° compuesto por un solenoide CCT (FUSILLO) con un campo central dipolar puro de 3,0 T, que actualmente se encuentra probas en el CERN. Actualmente se está desarrollando una segunda familia de imanes, que utilizan imanes CCT rectos, cortos y compactos, sin hierro, dentro de la subvención MRR de ISRS-España (3 M€, 700 k€ asignados al IEM). La novedad del desarrollo reside en la implementación de funciones dipolares y cuadrupolares en un imán CCT compacto y corto, que incluye un criostato de fácil operación que puede permitir la circulación del haz de iones. El primer prototipo, llamado MAGDEM (Magnet Demonstrator), se integrará en un sistema de focalización y transporte de haz dedicado y se ensamblará en un banco de pruebas adecuado para llevar a cabo experimentos con haces reales. En el IEM desarrollamos el sistema de focalización del banco de pruebas (cuadrupolos calientes y sistemas de monitoreo de haz), la cámara reacción con diferentes tipos de blancos (sólidos y tipo jet) y los detectores de plano focal. El sistema se instalará en el CMAM, donde se podrán hacer pruebas ya sea con protones o iones pesados en haz continuo o con haz pulsado en el rango de energía entre 1 y 10 MeV.

EXPERIMENTO NP1712-RIBF162: PRIMERA ESPECTROSCOPIA GAMMA DEL ^{135}Sn : Andrea Jungclaus, PhD Jaime Acosta

La desexcitación de los estados excitados del núcleo ^{135}Sn , con tres neutrones fuera del “core” doblemente mágico de ^{132}Sn , se estudió en un experimento realizado en la Fábrica de Haces de Isótopos Radiactivos (RIBF, en inglés) en RIKE, Japon. Se observaron distintos rayos-gamma emitidos por los iones excitados de ^{135}Sn formados tras las reacciones de knock-out de un neutrón y de un neutrón y un protón de los núcleos ^{136}Sn y ^{137}Sb , respectivamente, contra un blanco de berilio a energías relativistas. Análogamente a la población del ^{133}Sn mediante el knock-out de un neutrón desde el ^{134}Sn , la energía de excitación de 695(15) keV se asignó al estado $3/2^-$ con el mayor comportamiento uniparticular en el ^{135}Sn . Este resultado, que ha sido recientemente enviado para publicación en Physics Letters B (A. Jungclaus et al., “Position of the single-particle $3/2^-$ state in ^{135}Sn and the N=90 subshell closure”) proporciona por primera vez información directa acerca de la evolución de la estructura de capas de los neutrones por encima de N=82 y por lo tanto constituye una prueba crucial para los cálculos de modelo de capas en esta región. Los hallazgos experimentales se encuentran en total acuerdo con los cálculos realizados empleando interacciones microscópicas efectivas a dos cuerpos, derivados de potenciales nucleón-nucleón CD-Bonn y N3LO, que no predicen la existencia de una subcapa para el número de neutrones N=90. La existencia de dicha capa en el ^{140}Sn , es decir, cuando el orbital $1f_{7/2}$ está completamente lleno, fue propuesta anteriormente, de manera análoga al carácter mágico del ^{48}Ca , que muestra un orbital $0f_{7/2}$ completamente lleno una capa del oscilador armónico por debajo.

CARGAS EFECTIVAS EN NÚCLEOS PESADOS: Andrea Jungclaus, PhD Jaime Acosta

El ya conocido isómero con $I_p = 8_1^+$, $E_x = 2129$ keV del núcleo semi-mágico $^{130}\text{Cd}_{82}$ se pobló mediante la fisión de un proyectil de ^{238}U en la Fábrica de Haces de Isótopos Radiactivos (RIBF, en inglés) en RIKEN, Japon. La elevada estadística de los datos acumulados permitió determinar la energía de excitación, $E_x = 2001.2(2)$ keV, y la semivida, $T_{1/2} = 57(3)$ ns, del estado $I_p = 6_1^+$ basándose en la información de coincidencias $\gamma\gamma$. Además, la semivida del estado 8_1^+ , $T_{1/2} = 224(4)$ ns, fue medida de nuevo con mayor precisión. La nueva información experimental, junto con los datos disponibles del ^{134}Sn y los cálculos de modelo de capas de gran escala, permitió extraer cargas efectivas de protón y neutrón para el ^{132}Sn , un núcleo doblemente mágico lejos del valle de estabilidad. Una comparación con el caso análogo del ^{100}Sn proporciona por primera vez información fiable en relación a la dependencia de isospin de las cargas efectivas isoescalares e isovectoriales en núcleos pesados. Este trabajo ha sido recientemente enviado para publicación a la revista Physical Review Letters (A. Jungclaus et al., “Excited-state half-lives in ^{130}Cd and the isospin dependence of effective charges”).

Espectroscopía gamma de alta resolución del ^{136}Te con HiCARI @RIBF-RIKEN: PhD Jaime Acosta, Dra. Andrea Jungclaus

Durante el año 2023, se ha realizado un gran progreso en el análisis del experimento RIBF193, ya introducido en las Memorias del Instituto de los años 2021 y 2022. El experimento consistió en la espectroscopía gamma en vuelo de distintos haces nucleares radiactivos a energías relativistas, tomando el ^{136}Te como objetivo principal de la investigación. Con la reconstrucción Doppler de los espectros de energía y el

correspondiente ajuste a los mismos usando simulaciones hechas con Geant4, es posible medir las energías y vidas medias de los estados excitados de los núcleos tras reaccionar con el blanco secundario, además de las secciones eficaces de reacción. Los canales de reacción inelástico y $1n$ del ^{136}Te , medidos con los blancos de Au y Be respectivamente, han sido analizados, y con ello se han obtenido las energías y vidas medias de los estados excitados colectivos $2+$, $4+$, $6+$ y $8+$. Estas vidas medias están de acuerdo con los valores previamente publicados en la literatura, pero cuentan con incertidumbres significativamente más bajas. La vida media del $8+$ ha sido medida por primera vez. El siguiente objetivo es determinar las secciones eficaces de reacción exclusivas, lo que permitirá un estudio más completo de este núcleo. Incidentalmente, parte de los datos del experimento NP1912-RIBF189, que fue realizado como parte de la misma campaña experimental con el objetivo de estudiar núcleos con $N=82$ por debajo del ^{132}Sn , fueron también analizados con el fin de comprobar la consistencia del método. En particular, las energías y vidas medias de los estados excitados del ^{131}Sn y del ^{132}Sn han sido medidas, lo cual gracias al gran volumen de datos en este experimento proporcionará algunas pistas de lo que cabe esperar en nuestro caso de interés, el ^{136}Te .

[Estudio de estados monopartícula en núcleos de la capa fp mediante la reacción de transferencia \$^{50}\text{Ca}\(d, p\)^{51}\text{Ca}\$ @RIBF-RIKEN: PhD Carlos Ferrera González, Andrea Jungclaus](#)

Se ha proseguido con el análisis del experimento SHARAQ12, realizado en las instalaciones RIKEN-RIBF, Japón en diciembre de 2022 (ver Memoria 2022). Este experimento tiene como objetivo el estudio de la estructura de monopartícula del ^{51}Ca a través de la reacción de transferencia $^{50}\text{Ca}(d, p)^{51}\text{Ca}$, para ello se ha hecho interactuar un haz secundario de ^{50}Ca degradado en energía hasta aproximadamente 15.2 MeV/nucleón con un blanco secundario de CD2 ($\rho = 260 \text{ g/cm}^3$). La calibración de los detectores de tracking “Strip Readout Parallel Plate Avalanche Counters” (SR-PPACs) colocados a lo largo de la línea de haz ha permitido caracterizar la posición, velocidad y composición del haz en diferentes etapas. En primer lugar, se ha realizado la identificación de partículas del haz incidente, determinándose una pureza de ^{50}Ca en el separador BigRIPS de entorno al 70%. Posteriormente se han establecido la posición, ángulo y energía con las que el ^{50}Ca llega al blanco secundario colocado en la línea OEDO, esto es fundamental para reconstruir la reacción (d,p). Por último, se ha calculado el ratio masa-carga de las partículas que atraviesan el blanco, lo que ha permitido identificar ^{51}Ca en el espectrómetro SHARAQ. En paralelo se ha realizado la calibración y análisis de energías del detector de silicio segmentado TINA2, obteniéndose un espectro de excitación y su correspondiente distribución angular, con esto se han podido identificar los primeros protones provenientes de la reacción de transferencia de un neutrón. Actualmente el objetivo es identificar la mayor cantidad de reacciones $^{50}\text{Ca}(d, p)^{51}\text{Ca}$ posibles, utilizando de forma combinada el espectrómetro SHARAQ y el detector TINA2.

[Cu decay into neutron-rich Zn isotopes: shell structure approaching \$^{78}\text{Ni}\$: D. Palacios Suárez-Bustamante \(master student\), B. Olaizola](#)

Este experimento tuvo como objetivo estudiar los isótopos ricos en neutrones de Zn cerca del ^{78}Ni para explorar la evolución de los orbitales de protones y neutrones. Los isótopos ricos en neutrones de Zn, particularmente de $A=74$ a $A=79$, son fundamentales para comprender la estructura nuclear de la región, ya que llenan progresivamente la capa $g_{9/2}$.

Descubrimientos recientes desafían los conceptos establecidos de números mágicos, sugiriendo el potencial para nueva física en isótopos lejos de la estabilidad, incluyendo fenómenos como la coexistencia de formas. El proyecto se centra en la desintegración β de isótopos de Cu a Zn, con el objetivo de refinar el esquema de niveles y medir las vidas medias de las transiciones, arrojando así luz sobre la colectividad y la evolución del modelo de capas cerca de $N=50$. La instalación experimental incluye la Estación de Desintegración de ISOLDE (IDS) con equipos de detección avanzados para mediciones precisas. Los principales objetivos, para los isótopos impares de Zn, es el estudio de estados de partícula independiente, y la resolución de discrepancias en los datos experimentales para los isótopos pares-pares de Zn. Esta investigación es de interés en astrofísica, particularmente en lo que respecta al proceso r en la nucleosíntesis. Este experimento ya ha generado una gran cantidad de datos que están siendo analizados por varios estudiantes. En particular, D. Palacios Suárez-Bustamante analizó la desintegración de ^{77}Cu en $^{76,77}\text{Zn}$ como parte de su tesis de maestría en el IEM-CSIC. La defendió con éxito obteniendo la calificación más alta de su promoción (empatado con B. Errandonea Félix).

[IS709: Exploring shape coexistence across \$N=60\$ in \$^{100}\text{Sr}\$ using IDS: PhD J. Sánchez Prieto, B. Olaizola \(PIE-20235AT018\)](#)

Este experimento tiene como objetivo investigar la estructura nuclear del ^{100}Sr identificando estados excitados 0^+ para arrojar luz sobre el cambio repentino observado en la deformación nuclear de esta cadena isotópica. El estudio planea poblar estados excitados de isótopos de Sr a través de la desintegración β y β -n del $^{100,101}\text{Rb}$ en la Estación de Desintegración de ISOLDE (IDS), utilizando el Espectrómetro para la Detección de Electrones (SPEDE) para identificar estados 0^+ mediante correlaciones angulares γ - γ y observaciones de transiciones E0. La importancia del experimento se basa en el fenómeno de coexistencia de formas, evidente en la drástica transición de deformación en las cadenas de isótopos de Sr y Zr cerca del número de neutrones $N \approx 60$. Esta transición se caracteriza por cambios notables en los radios de carga, una caída en la energía de excitación del estado 2^+ , y valores aumentados de $B(E2: 2^+ \rightarrow 0^+)$ que indican un cambio de formas nucleares de esféricas a fuertemente deformadas. Las predicciones teóricas sugieren una coexistencia de forma deformada y esférica, con un posible estado excitado 0^+ de baja energía en el ^{100}Sr indicando una configuración esférica. Investigaciones previas han insinuado tales estados, pero carecen de evidencias concluyentes, especialmente para isótopos por encima de $N=60$. El experimento está planeado que se realice durante la campaña de 2024 en ISOLDE. Sin embargo, durante 2022, se nos concedió un tiempo de haz parcial de este experimento, enfocado en medir las vidas medias de estado excitado usando el método de coincidencias ultra-rápidas con cristales de $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$. J. Sánchez Prieto actualmente está analizando los datos, como parte de su tesis doctoral. Resultados muy preliminares sugieren la presencia de múltiples estados con vidas medias lo suficientemente largas como para que puedan extraerse con este método.

[The lifetime of \$^{54}\text{Ti}\$ and the proposed \$N=32\$ shell gap: B. Errandonea Félix \(master student\), B. Olaizola \(RYC2021-031494-I\)](#)

Existe una creciente evidencia de que, lejos del Valle de Estabilidad, las energías relativas entre las capas nucleares cambian, dando lugar a nuevos Números Mágicos y a la desaparición de los antiguos. Uno de esos casos es el ^{52}Ca ($Z=20$, $N=32$), para el cual se midió valor $E(2^+)$ muy alto, sugiriendo la presencia de un nuevo salto de capa. Sin embargo,

el ^{54}Ti ($Z=22$, $N=32$), apenas dos protones por encima, presenta una vida media demasiado corta para lo esperado en un núcleo semi-mágico. El experimento S5422 llevado a cabo en TRIUMF, Canadá, utilizando el espectrómetro estado-del-arte GRIFFIN, tuvo como objetivo volver a medir la vida media del ^{54}Ti con mayor precisión y expandir en gran medida el esquema de niveles del ^{54}V . B. Errandonea Félix analizó parte de los datos de este experimento y encontró que la vida útil es, de hecho, varias veces más larga de lo que se había observado anteriormente. También encontró una gran cantidad de nueva información sobre la estructura del ^{54}V . Esto formó parte de su tesis de maestría en el IEM-CSIC la cual defendió exitosamente obteniendo la calificación más alta de su curso.

[Structure of neutron-rich Fe nuclei below \$N=40\$ \$^{68}\text{Ni}\$: K.I. Hassan \(master student\), R. Umashankar \(PhD student, TRIUMF-UBC, Canada\), B. Olaizola \(RYC2021-031494-I\)](#)

Inicialmente se sugirió que $N=40$ podría ser un nuevo número mágico para el ^{68}Ni , lejos de la estabilidad, pero se observó que para los isótopos de Fe y Cr (dos y cuatro protones por debajo) era el escenario opuesto. Esto se explicó mediante cálculos del modelo de capas utilizando la interacción LNPS como una isla de inversión alrededor del ^{64}Cr . En esta región la energía entre el orbital $g_{9/2}$ y la capa pf se reducen tanto que se favorece el salto de neutrones al orbital $g_{9/2}$, induciendo una fuerte deformación en el estado fundamental. Este experimento, realizado usando GRIFFIN en TRIUMF, Canadá, tuvo como objetivo estudiar la desintegración beta de isótopos ricos en neutrones de Mn al Fe. El análisis está siendo llevado a cabo por varios estudiantes y postdoctorados. Específicamente, R. Umashankar, de TRIUMF-UBC, Canadá, está analizando la desintegración del ^{68}Mn y está construyendo el primer esquema de niveles comprensivo de ^{68}Fe . Esto es parte de su tesis de doctorado, la cual se espera defienda en 2025. R. Umashankar visitó el IEM-CSIC para trabajar con B. Olaizola y avanzar en su análisis durante dos semanas en el 2023. K.I. Hassan analizó la desintegración de ^{62}Mn a ^{62}Fe . Amplió considerablemente el esquema de niveles conocido y ubicó algunos estados 0^+ tentativos. Este análisis formó su tesis de maestría, como parte del prestigioso Máster Erasmus Mundus en Física Nuclear. Fue galardonado con la máxima calificación disponible en la Universidad de Padua, Italia.

[WASA@FRS: DeepHyp - Técnicas de deep learning para el estudio de hipernúcleos exóticos \(CAM-Talento ref: 2019-T1/TIC-13194\) C. Rappold, PhD S. Escrig López](#)

Dentro de la colaboración WASA@FRS, la campaña experimental WASA-FRS se llevó a cabo con éxito en el primer trimestre de 2022, con la finalización del experimento S447 de espectroscopia de hipernúcleos y el experimento S490 de núcleos con eta-prime ligados en las instalaciones de GSI-FAIR, Alemania. Nuestra colaboración hispano-japonesa entre el CSIC - España y RIKEN - Japón está a la vanguardia en la reconstrucción del rompecabezas de los hipertriones mediante la aplicación de técnicas de aprendizaje profundo con el experimento WASA-FRS y con un segundo experimento J-PARC E07. También lideramos la búsqueda e identificación de hipernúcleos utilizando técnicas de aprendizaje profundo en emulsiones nucleares irradiadas por haces de kaones en el experimento J-PARC E07. Actualmente nos centramos en medir la energía de enlace de los hipertriones con la mayor precisión del mundo. La emulsión nuclear, una película fotográfica especializada que registra las trayectorias de partículas cargadas, se emplea en este experimento por su resolución espacial submicrónica. Se ha desarrollado un método de búsqueda para explorar exhaustivamente todo el volumen de la placa de emulsión nuclear y detectar eventos de

interés. Para analizar una gran cantidad de datos de imagen de manera eficiente, introducimos una técnica de detección de objetos utilizando el modelo de aprendizaje profundo Mask R-CNN para detectar los hipertriones desintegrados. Superando el reto de obtener suficientes datos de entrenamiento, se creó un modelo de red generativa adversarial (GAN) utilizando datos de simulación de Geant4 e imágenes de fondo reales de emulsiones nucleares. Esto facilitó el entrenamiento de Mask R-CNN, permitiéndonos encontrar por primera vez la desintegración de hipertriones en la placa de emulsión mediante IA. El análisis en curso de un gran conjunto de datos ya ha conducido a la identificación única de eventos asociados a la desintegración de hipertriones, con la determinación de la energía de enlace actualmente en curso. El nuevo desarrollo usando inteligencia artificial (IA) se dirige ahora al aprendizaje no supervisado con el fin de analizar toda la placa de emulsión por segmentación y discriminar así las huellas de partículas cargadas en todo el volumen de las pilas de emulsión. Los primeros resultados pueden verse en los siguientes paneles, en los que la imagen de emulsión extraída (panel izquierdo, a), es analizada por un modelo de IA que segmenta las pistas, y el segundo modelo de seguimiento de IA nos permite agrupar y discriminar cada pista con metadatos útiles para realizar una búsqueda general de vértices de decaimiento.

[Hyp@FRS - Métodos de aprendizaje automático aplicados a la espectroscopia de hipernúcleos: el puzzle de la vida útil de hipertritio y de la existencia de nnLambda estudiados en WASA@FRS: C. Rappold, S. Escrig Lopez](#)

El objetivo de Hyp@FRS es estudiar con precisión los hipernúcleos ligeros con reacciones inducidas por iones empleando el separador de fragmentos de las instalaciones GSI y FAIR de Darmstadt (Alemania) como espectrómetro de alta resolución. El objetivo de Hyp@FRS es la mejora de la espectroscopia mediante el aprendizaje automático. La actividad propuesta gira en torno al proyecto WASA@FRS que tiene lugar en las instalaciones GSI-FAIR. Con el éxito del experimento S447, el proyecto propuesto tiene como objetivo validar o descartar los descubrimientos que publicamos de nuestra primera campaña experimental HypHI - Fase 0. Se llevará a cabo el desarrollo de métodos innovadores en aprendizaje automático sobre los experimentos de espectroscopia hipernuclear. En primer lugar, se investigarán las redes neuronales convolucionales y las arquitecturas de memoria a corto plazo para el modelado no lineal de la óptica de iones en el espectrómetro magnético y, en segundo lugar, en el seguimiento de las partículas medidas en el aparato experimental. La campaña del experimento WASA@FRS tuvo lugar durante el primer trimestre de 2022. El análisis de datos utilizará los métodos de aprendizaje automático explicados anteriormente. Además, en este proyecto se lleva a cabo la I+D para la lectura electrónica de los microdetectores de vértice de silicio y su construcción. El objetivo final del proyecto es resolver el rompecabezas actual de la vida del hipertritón y la confirmación de la observación del estado ligado $nn\Lambda$ (un estado de dos neutrones y un hiperón Λ).

NewHyp - Nuevos desarrollos basados en técnicas de aprendizaje automático en la búsqueda de señales hipernucleares en las colisiones ${}^6\text{Li}-{}^{12}\text{C}$ y ${}^{12}\text{C}-{}^{12}\text{C}$ del experimento WASA-FRS HypHI : C. Rappold

Las observaciones multimensajero en astrofísica se han convertido en un elemento clave para restringir la ecuación de estado nuclear y las características de las estrellas de neutrones. Las características estelares de una estrella de neutrones se ven ampliamente afectadas por las interacciones bariónicas. Las restricciones de las observaciones experimentales de iones pesados muestran una notable consistencia con las mediciones astrofísicas y proporcionan

información complementaria a densidades intermedias. En ese aspecto, se prevé que la producción de hipernúcleos exóticos en reacciones inducidas por iones añada observables precisos a mayor densidad que los obtenidos en experimentos anteriores. El análisis de datos de las colisiones ${}^6\text{Li}-{}^{12}\text{C}$ y ${}^{12}\text{C}-{}^{12}\text{C}$ a 2 GeV por nucleón del experimento WASA@FRS HypHI será el objetivo central del proyecto NewHyp. Dentro NewHyp, desarrollamos nuevas técnicas de aprendizaje automático para reforzar las señales hipernucleares. Se llevará a cabo el desarrollo de métodos innovadores en el aprendizaje automático sobre los experimentos de espectroscopia hipernuclear para separar mejor la contribución de fondo de la señal hipernuclear en la reconstrucción de la masa invariante. El proyecto pretende mejorar la determinación del punto de interacción de las colisiones, aumentar la relación fondo/señal de la observación hipernuclear. Esto nos permitirá tener la observación más clara de los diferentes hipernúcleos de interés: $3\Lambda\text{H}$, $4\Lambda\text{H}$, $\text{nn}\Lambda$, y $9\Lambda\text{B}$, primero hipernúcleos ricos en protones. NewHyp demostrará un nuevo enfoque experimental abre el camino para la observación de hipernúcleos ricos en protones con colisiones nucleares por primera vez. La mejora necesaria para el futuro experimento WASA-FRS se derivará del análisis de los datos y del desarrollo propuesto en la electrónica. Por último, el proyecto NewHyp aspira a crear una unidad de proceso de inferencia de aprendizaje automático en el chip para comprimir el flujo de datos y aumentar el sistema de adquisición de datos del WASA-FRS.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Hielos astrofísicos.
- Caracterización espectroscópica de plasmas fríos de interés astrofísico.
- Generación, procesado y modelado de análogos de polvo interestelar.
- Espectroscopía Raman en chorros supersónicos de gases.
- Transferencia de energía por colisiones moleculares inelásticas.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes en procesos colisionales, atmosféricos o de combustión.
- Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, cementos C3S y C2S, hielos de interés astrofísico y estudio de adsorción de contaminantes atmosféricos en materiales porosos tipo zeolita y carbón activo.
- Control cuántico de alineamiento y orientación en moléculas aisladas y gases dipolares ultra fríos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía de infrarrojo y espectrometría de masas aplicadas a sistemas de baja temperatura y baja presión.
- Métodos Computacionales: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Generación de plasmas fríos complejos con descargas RF a baja presión.
- Espectrometría de masas de neutros y iones. Sondas de Langmuir.
- Espectroscopía de emisión en el visible y UV próximo. Polarimetría.
- Espectroscopía Raman lineal y no lineal (estimulada).
- Chorros supersónicos de gases.
- Espectroscopía de Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por Diferencia de Frecuencias.

LABOR INVESTIGADORA:

FLUIDODINÁMICA MOLECULAR

Durante 2023 hemos continuado con el estudio del CO₂ fuera del equilibrio a altas temperaturas, con la aplicación de la espectroscopía Raman en microfluídica gaseosa, y con la caracterización espectroscópica de contaminantes atmosféricos, en el marco de los proyectos en curso. Todos estos estudios se basan en experimentos en chorros sub- y supersónicos de gases, examinados mediante espectroscopía Raman cuantitativa. Los chorros subsónicos de gases permiten medir propiedades espectrales de las moléculas en condiciones incompatibles, o difícilmente alcanzables, en células. Por su parte, los chorros supersónicos de gases son un medio extraordinariamente fértil en dinámica de fluidos, donde es posible estudiar las colisiones intermoleculares inelásticas, el mecanismo fundamental de transferencia de energía en gases. Para ello en el laboratorio de Fluidodinámica Molecular disponemos 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 veinticinco años.

Hemos continuado con el estudio de la relajación rotacional y vibracional del CO₂. La relajación del CO₂ juega un papel clave en el balance radiativo de la atmósfera terrestre, así como de la de Venus y Marte, la entrada de naves en esos planetas, o la síntesis de combustibles mediante plasmas fríos de CO₂, a pesar de lo cual escasean los datos experimentales de los procesos elementales implicados. Hemos realizado nuevos experimentos de chorros supersónicos de CO₂ puro y diluido al 10% en He, para completar el corpus de datos experimentales sobre las colisiones inelásticas del CO₂. Por otra parte, para determinar con más precisión las intensidades intrínsecas (momentos de transición de la polarizabilidad) de las bandas vibracionales Raman, hemos realizado nuevas medidas cuantitativas del espectro Raman de CO₂ extremadamente caliente hasta 1500 C, en dos sistemas distintos: un flujo lento desde un tubo calentado al rojo mediante inducción magnética, y una llama de CH₄+O₂ enriquecida con CO₂. Las intensidades absolutas así obtenidas permiten cuantificar la densidad total de moléculas y las poblaciones de los niveles de energía rotacionales y vibracionales en medidas sobre chorros de gases, que se pueden transformar a las correspondientes temperaturas TROT y TVIB, mostrando la rotura del equilibrio termodinámico. De su evolución temporal a lo largo de los chorros, hemos podido determinar los coeficientes de transferencia entre niveles internos por colisiones inelásticas, y a partir de estos, otras magnitudes del flujo como tiempos de relajación o viscosidad de volumen. Se ha enviado a publicar un primer artículo sobre las tasas de relajación rotacional en el rango térmico de 60 a 260 K.

En el marco del proyecto europeo ATMOS, hemos seguido trabajando en los espectros Raman de la acetona, CH₃COCH₃, y diacetilo, CH₃COCOCH₃. Estas moléculas están implicadas en los ciclos de degradación atmosférica de varios compuestos orgánicos volátiles (VOC, por sus siglas en inglés). Hemos registrado el espectro Raman completo de diacetilo (gas) en expansión supersónica, tanto puro como diluido en He o Ar. Un primer análisis de este espectro, incluyendo el cálculo de las frecuencias e intensidades desde primeros principios, ha constituido el Trabajo fin de Grado del estudiante Marcos de Lucas, de la Universidad Complutense. Por otra parte, hemos registrado el espectro Raman de la acetona (gas) a distintas temperaturas en una célula calefactada hasta 100 C. Es de destacar la gran variación del perfil de la banda a 780 cm⁻¹, debido a la competencia de numerosas

bandas calientes, lo que permite usar esa banda como sonda termométrica. El análisis realizado por la Dra. Samira Dalbouha, de la U. Mohamed V de Rabat, ha permitido localizar tentativamente una resonancia de Fermi desconocida hasta ahora. Se espera que el análisis de estos espectros permitirá una mejor caracterización de la dinámica intramolecular y la detección remota de esas especies. Este trabajo se realiza en colaboración con el departamento de Química y Física Teóricas del IEM (M.L. Senent).

Por último, en la línea de microfluídica se han construido y probado dos nuevas células con canales internos de $1 \times 5 \text{ mm}^2$. Por esos canales se hicieron fluir mezclas de N_2 y vapor de acetona, y se forzaron gradientes térmicos entre dos de sus caras. Mediante los espectros Raman de esas especies hemos conseguido medir la temperatura del gas dentro de esos canales tan pequeños, observando gradientes térmicos de más de 15 K a lo largo de las dimensiones transversales. El gradiente a lo largo de la dimensión corta (1 mm) se consiguió medir mediante una geometría novedosa a 45° , en la que la misma ventana se emplea para la excitación y la colección. Parte de este trabajo se incluye en la tesis doctoral de Slaven Bajic, en el marco de una colaboración con el grupo del profesor S. Colin de la Universidad Paul Sabatier de Toulouse (Francia).

FÍSICA MOLECULAR DE SISTEMAS ASTROFÍSICOS Y PLASMAS

Hielos astrofísicos.

Motivados por la reciente detección de indeno en fase gaseosa en regiones frías del medio interestelar y con el objetivo de guiar su posible detección en fase sólida en los hielos en estos entornos, se han proporcionado espectros IR de indeno a baja temperatura. El indeno es el primer miembro de la familia de los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs por sus siglas en inglés) detectado de modo inequívoco. En nuestros experimentos, se han generado hielos de indeno e indeno/agua mediante depósito desde fase vapor sobre una superficie fría, a temperaturas entre 10 K y 160 K, en condiciones de alto vacío y se han obtenido sus espectros infrarrojos entre 4000 y 500 cm^{-1} ($2,5\text{--}20 \mu\text{m}$), además de las fuerzas de banda. Se han identificado dos fases sólidas de indeno, amorfa y policristalina. Para hielos generados a 10 K y calentados a 1 K/min la transición de fase de amorfa a cristalina tiene lugar entre 120 K y 130 K. El sólido se sublima a 180 K bajo condiciones de alto vacío. Además, se han estudiado hielos de indeno diluido al 2 % y 7 % en hielo de agua amorfa a 10 K. Los espectros infrarrojos de estas mezclas muestran que la molécula de indeno no se ve muy alterada por el entorno de hielo de agua. Desde el punto de vista teórico se construyeron sólidos cristalinos y amorfos de indeno y se calcularon sus espectros infrarrojos utilizando la teoría funcional de la densidad. A falta de información previa sobre la estructura cristalina del indeno, se ha sugerido una simetría monoclinica para el cristal, basándonos en la comparación de los espectros IR calculados y experimentales.

Por otro lado, con el objetivo de ayudar a comprender las vías de formación de esta molécula, hemos investigado la estabilidad de hielos de indeno y de mezclas indeno/agua bajo irradiación VUV (120 -180 nm) y bombardeo de electrones de alta energía (5 keV) en condiciones relevantes para el medio interestelar. Se utilizó espectroscopia IR para seguir los efectos de la irradiación in situ en la cámara de alto vacío. Los experimentos proporcionaron información sobre secciones eficaces de destrucción, así como sobre la química de disociación de esta especie. El tolueno y el estireno se identificaron en el espectro IR del hielo irradiado. La formación de especies más complejas, como cetonas y alcoholes, también es evidente en los espectros IR y se detectó complementariamente en experimentos

de desorción térmica programada. En lo referente a las secciones eficaces de destrucción de hielo de indeno puro, se observó que tanto la destrucción por fotólisis o radiólisis no dependen de la temperatura del hielo, entre 10 K y 130 K. En los experimentos de irradiación de mezclas de indeno/agua se observó que el hielo de agua no protege al indeno de los efectos de los fotones VUV o de los Rayos C3smicos (simulados en el nuestro laboratorio por electrones de 5 keV) sino que, por el contrario, participa en la qu3mica que potencia su destrucci3n.

Los experimentos sobre indeno se comenzaron en el a3o 2022, pero ha sido durante este a3o 2023 cuando se han completado, analizado y publicado en *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* y *Astronomy & Astrophysics* (enero 2024).

En noviembre realizamos una estancia en la instalaci3n Atomki donde estudiamos la qu3mica inducida por rayos c3smicos en hielos que contienen hidroxilamina. Se estudiaron hielos de NH₂OH puro y mezclas con H₂O, CO y D₂O a 20 K, irradiados con iones H⁺ de 15 keV. El objetivo del estudio es encontrar mol3culas org3nicas complejas en los hielos procesados y en aprender c3mo las diferentes composiciones del hielo afectan la qu3mica y la eficiencia de destrucci3n del NH₂OH por los rayos c3smicos. Aunque las v3as qu3micas que conducen a la formaci3n de NH₂OH en los hielos astrof3sicos se han estudiado a fondo, hasta donde sabemos, el siguiente paso en la evoluci3n qu3mica que comenzar3a con el NH₂OH como precursor en el hielo no se ha abordado experimentalmente. Los datos obtenidos est3n en fase de an3lisis para su posterior publicaci3n.

Durante el a3o 2023 y anteriores hemos participado activamente en el grupo de trabajo del Ice-Age Early Release Program “Tracing the building blocks of life with the James Webb Space Telescope”, en particular en la secci3n de “astrof3sica de laboratorio”. Nuestra aportaci3n no es s3lo proporcionar nuevos datos experimentales sino utilizar adecuadamente los disponibles en la literatura, haciendo uso de nuestro conocimiento de sus caracter3sticas espec3ficas. Las observaciones con Ice-Age de la nube densa Camale3n I nos han permitido obtener informaci3n del tama3o de los granos de hielo/polvo presentes en dichas nubes. Para ello se ha simulado el perfil espectral de la observaci3n teniendo en cuenta efectos de dispersi3n m3s absorpci3n, utilizando las adecuadas constantes 3pticas de hielos y de an3logos de polvo. Se ha confirmado que los granos alcanzan tama3os microm3tricos, lo que implica innumerables cambios en la interpretaci3n de la microf3sica local. El trabajo ha sido aceptado en *Nature Astronomy* y se publicar3 en enero de 2024.

[Espectroscop3a infrarroja de iones moleculares de inter3s astrof3sico.](#)

Se ha completado la instalaci3n del recirculador criog3nico para el enfriamiento del c3todo hueco. Este sistema nos permite disipar la energ3a t3rmica del plasma (~100 W) y enfriar las especies (-75 C), contribuyendo a una intensificaci3n y simplificaci3n del espectro. Se han realizado pruebas preliminares para implementar una descarga de radiofrecuencia sustituyendo (ocasionalmente) al c3todo hueco. Adaptando adecuadamente la impedancia de una bobina colocada en el interior del mismo reactor, podemos excitar un plasma sin necesidad de electrodos, lo que facilita la estabilidad del plasma en determinadas circunstancias. Se han publicado los resultados obtenidos al a3o anterior en colaboraci3n con los doctores O. Asvany, S. Schlemmer, D. Gupta y W. Silva de la Universidad de Colonia, sobre los espectros de vibraci3n-rotaci3n y rotaci3n pura de varios isotop3logos e is3meros de C₃H₃⁺. Muy recientemente, hemos extendido el estudio a otros modos de vibraci3n de diferente simetr3a. Hay que destacar que los datos experimentales de espectroscop3a de alta resoluci3n experimentales han permitido identificar un nuevo i3n

molecular en el medio interestelar: el H_2CCCH^+ (propargilo), para lo que hemos contado con la colaboración del grupo de Astrofísica Molecular del IFF-CSIC. El isómero $c\text{-C}_3\text{H}_3^+$ (ciclopropenilo) es energéticamente más favorable y más abundante, pero la ausencia de momento dipolar eléctrico excluye su detección en las bandas de radioastronomía. También hemos obtenido datos de alta calidad de la variante deuterada $c\text{-C}_3\text{H}_2\text{D}^+$, pero la pequeña magnitud de su momento dipolar, y la menor abundancia de D, no han permitido su detección en el espacio.

Generación, caracterización y procesado de análogos de polvo interestelar.

Se han generado análogos de polvo cósmico nanoestructurado en la cámara de plasma acoplada capacitivamente. Se han medido las concentraciones, tanto de moléculas neutras como cargadas, en condiciones previas a la nucleación de nanopartículas en plasmas de Ar/C₂H₂ con contenidos variables de N₂. Se ha encontrado una rica colección de iones, con particular interés en los cargados negativamente, poco estudiados previamente en la bibliografía, y que llegan a alcanzar masas superiores a 200 uma, mostrando comportamientos muy dispares entre unos y otros frente a la concentración de N₂. Destaca el hecho de que las concentraciones de los aniones C_n=parH⁻ y C_n=imparN⁻ (con n < 10) únicos detectados por el momento en el espacio interestelar, presentan, a baja concentración de N₂, distribuciones parecidas a las observadas en el espacio. Se están realizando esfuerzos, tanto teóricos como experimentales, para explicar los procesos que ocurren en estos plasmas. Parte del estudio ha sido presentado en la International Conference on Research and Applications of Plasmas, PLASMA 2023 en Varsovia, Polonia.

Se ha implementado un sistema basado en la dispersión laser que permite obtener la distribución espacio-temporal de los tamaños de nanopartículas dentro de la cámara. También se ha medido la evolución temporal de la concentración de especies neutras, la densidad del polvo, la densidad electrónica o su temperatura. Dicho estudio ha sido presentado en una conferencia invitada en la CPPA 2023, XXth International Conference on Plasma Physics and Applications, en Iasi, Rumanía. En colaboración con el IAA-CSIC se ha caracterizado la respuesta óptica de estas nanopartículas. Estos análisis permiten caracterizar tanto el proceso de crecimiento como las propiedades del polvo nanoestructurado. Este trabajo se ha publicado en la revista *Astrophysical Journal Supplement Series*.

Se han generado láminas delgadas en plasmas de He/CH₄ acoplados inductivamente que han sido irradiadas en el 3MV Tandetron (Rumania) en colaboración con I. Topala (U. Iasi). Estas irradiaciones han permitido analizar cómo la morfología de los análogos influye en el efecto generado por los rayos cósmicos.

Dinámica de reacciones químicas elementales.

En colaboración con el Departamento de Química Física de la Universidad Complutense (Unidad asociada CSIC), se han continuado los estudios teóricos sobre la reactividad del sistema F+HD a muy bajas energías de colisión (< 1 meV). En concreto se están estudiando los acoplamientos entre los momentos orbitales y rotacionales a la entrada y a la salida, efectos de la conservación de la paridad y posibles anisotropías entre los dos canales isotópicos de salida.

Modelización atomística y caracterización experimental de fases minerales, arcillas, cementos C3S y C2S, hielos de interés astrofísico y estudio de adsorción de contaminantes atmosféricos en materiales porosos tipo zeolita y carbón activo.

Las simulaciones de modelización computacional o cálculos mecano-cuánticos se han llevado a cabo a través e cálculos teóricos tanto en estaciones de trabajo como en superordenadores donde se han caracterizado de forma teórica las estructuras y espectros infrarrojos del hielo de indeno y donde dentro del campo de la astrofísica se han llevado a cabo una serie de simulaciones de la molécula de fosfina en entornos similares a las nubes de venus o en hielos cometarios resultados preliminares que se presentaron en la 7º reunión CPESS ("Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar") y cuya publicación está siendo redactada.

Así mismo dentro de las fases minerales se han llevado a cabo el cálculo de las propiedades espectroscópicas de las principales fases minerales del cemento portland la C2S y C3S cuyos excelentes resultados se publicaron en Cement and Concrete Research.

También se ha estudiado de forma teórica las características de absorción de moléculas contaminantes atmosféricos no suficientemente estudiados en este campo tipo nitroderivados tales como nitrofenol y nitroantraceno y su interacción con el carbón activo. Trabajos cuyos resultados se publicaron en RCS Advances.

ESPECTROSCOPIA LÁSER

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

La actividad llevada a cabo en el Laboratorio de Espectroscopía Láser durante el año 2023 constituye una continuación de la línea de investigación de años anteriores, iniciada en 2020 y que se centra en el estudio experimental de los ensanchamientos en líneas espectrales de sistemas colisionales binarios en los que se encuentra presente la molécula de monóxido de carbono, CO, ya sea como molécula activa o como colisionante, utilizando la técnica de espectroscopía Raman estimulada (SRS). Tras el intenso trabajo experimental realizado durante el año 2022 en diferentes sistemas colisionales, la actividad en el año 2023 se ha centrado en el tratamiento y análisis de los datos recabados en dichos experimentos, su comparación con los resultados obtenidos mediante simulación por parte otros grupos de investigación extranjeros con los que se mantiene una colaboración estable y la publicación de estos estudios comparados. Esta actividad se ha centrado en dos sistemas colisionales:

- CO-H₂, en la rama S ($\Delta J=2$) del espectro Raman de rotación pura.
 - CO-H₂, en la rama Q ($\Delta J=0$) del espectro Raman rovibracional de su vibración fundamental.
- En esta nomenclatura la primera molécula del par es la especie "activa", cuyo espectro se registra para estudiar las variaciones en las formas y anchuras de las líneas espectrales debidas a las colisiones, y la segunda molécula es la especie perturbadora.

La obtención de espectros Raman de rotación pura mediante la técnica SRS en el sistema CO-H₂ constituyó un hito experimental del laboratorio en 2022, dada la dificultad que presenta el acceso a números de onda tan bajos como los $\sim 11 \text{ cm}^{-1}$ de la línea de rotación S(0) con una técnica instrumental basada en la diferencia de frecuencias de dos fuentes láser. El análisis de los espectros registrados permitió la obtención, a tres temperaturas diferentes (77, 180 y 295 K), de conjuntos de coeficientes de ensanchamiento colisional para las líneas del espectro desde S(0) hasta S(20), así como de los correspondientes exponentes que modelizan su dependencia con la temperatura. A lo largo del año 2023 el profesor Franck

Thibault, de la Universidad de Rennes 1, ha llevado a cabo simulaciones computacionales en este sistema colisional utilizando métodos de cálculo close coupling (CC), de gran exactitud, y superficies de energía potencial de reciente publicación, obteniendo conjuntos de coeficientes de ensanchamiento colisional para las primeras líneas del espectro de rotación pura. Se ha llevado a cabo una comparación detallada entre nuestros resultados experimentales y los calculados por el profesor Thibault, que arroja una coincidencia excelente para todas las líneas comparadas a las tres temperaturas de referencia con excepción de la S(1).

En el caso del sistema CO-H₂ en rotación-vibración, y a partir de las secciones eficaces de colisión obtenidas en el curso del cálculo anterior, el profesor Thibault ha derivado, utilizando una serie de aproximaciones, conjuntos de coeficientes de ensanchamiento colisional para las líneas de la rama Q espectro rovibracional a las tres temperaturas a las que se llevaron a cabo las medidas en nuestro laboratorio, así como coeficientes de mezcla de líneas (line mixing) y exponentes de temperatura. Si bien no se esperaba que estos conjuntos de coeficientes fueran tan exactos como los obtenidos para el espectro de rotación pura, su coincidencia con nuestros valores experimentales para este sistema ha sido de nuevo muy satisfactoria, especialmente a las temperaturas de 298 y 195 K, mientras que a 77 K se observó una desviación observado-calculado del orden del 8% en el peor de los casos para los coeficientes de ensanchamiento de las primeras líneas del espectro rovibracional. Esta desviación se atribuye a las aproximaciones utilizadas en los cálculos.

Todos los detalles relativos a la realización de los experimentos y los correspondientes cálculos para estos dos sistemas se han recogido, junto con sus resultados y los correspondientes análisis comparativos, en un manuscrito enviado al Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer y que fue aceptado para su publicación el 15 de diciembre de 2023.

Adicionalmente, a lo largo de 2023 se han publicado dos artículos pertenecientes a la misma línea de investigación en ensanchamientos colisionales en sistemas de CO y que habían sido enviados a las respectivas revistas en 2022: el primero de ellos, publicado también en el Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, corresponde al estudio comparativo experimento/teoría similar a los arriba descritos que se llevó a cabo para el sistema N₂-CO, mientras que el segundo, de naturaleza puramente experimental, describe la expansión del espectrómetro SRS para su aplicación a las medidas en rotación pura del sistema CO-H₂ y la realización de las propias medidas y ha sido publicado en el Journal of Raman Spectroscopy.

Todos los trabajos mencionados, junto con otros ya publicados en años anteriores y que pertenecen a la misma línea de investigación, han formado parte de la tesis doctoral de Denís Paredes Roibás, cuya memoria, escrita a lo largo del año 2023, ya se ha depositado ante el rectorado de la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED). La tesis, titulada *“Medida de perfiles de líneas espectrales mediante espectroscopía RAMAN DE alta resolución: ensanchamientos colisionales en mezclas de CO”*, será defendida en esa universidad el 2 de febrero de 2024.

Además de los trabajos descritos, se ha aprovechado la pausa en la recogida de datos experimentales a lo largo de 2023 para realizar trabajos de mantenimiento en el laboratorio, entre los cuales destaca la sustitución definitiva de las obsoletas fuentes láser de Ar⁺ por láseres de estado sólido, mucho más compactos y eficientes y de manejo más sencillo.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

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).
- Microscopía electrónica de transmisión (TEM).
- Espectroscopía Raman.
- Dispersión de neutrones.

- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua, de extrusión capilar y elongacional.
- Microrreología
- Análisis mecánico-dinámico en tracción, flexión y compresión: módulo elástico.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y tetradetección y dispersión dinámica de luz láser (DLS).
- Litografía de nanoimpresión (NIL).
- Simulaciones mediante uso de computación de alto rendimiento.
- Microscopía de fuerzas atómicas (AFM).
- Espectroscopía de correlación de rayos X (XPCS).
- Micro-espectroscopía de rayos X en transmisión con barrido (STXM).
- Espectroscopía de absorción de rayos X (NEXAFS).
- Dispersión resonante de rayos X blandos (RSoXS).
- Impresión a chorro de polímeros.

LABOR INVESTIGADORA:

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

FASES FERROELÉCTRICAS EN NANOPARTÍCULAS DE POLIVINILIDENO DE FLUORURO

Dentro del marco del procesado avanzado y estudio de la relación entre la nanoestructura y las propiedades de polímeros funcionales, se han preparado nanopartículas ferroeléctricas de polivinilideno de fluoruro (PVDF) de diámetro medio en torno a 230nm, mediante la técnica de precipitación por diálisis, con un d. Se ha podido corroborar la ferroelectricidad de las nanopartículas usando microscopía atómica de piezorespuesta. El origen de esta ferroelectricidad se atribuye a la presencia de fases cristalinas eléctricamente activas, como hemos demostrado mediante calorimetría diferencial de barrido, espectroscopía infrarroja y difracción de rayos X.

MORFOLOGÍA DE BICAPAS DE POLÍMEROS FUNCIONALES

Se ha realizado un estudio de la morfología y la funcionalidad de bicapas formadas por un sustrato de polímero semiconductor (en concreto polihexiltiofeno, P3HT), y un recubrimiento de polímero ferroeléctrico (copolímeros de polivinilideno de fluoruro con trifluoroetileno, P(VDF-TrFE)). Mediante el estudio sistemático del espesor del sustrato y del espesor del recubrimiento se observó el papel de las diferentes componentes de la energía superficial de ambas capas en la formación de o bien un recubrimiento continuo o bien un recubrimiento con agujeros (fenómeno de ‘dewetting’). Este trabajo ha supuesto un avance en la comprensión del mecanismo de formación de recubrimientos estables y el control efectivo de la formación de agujeros en bicapas de polímeros funcionales, de especial importancia en la fabricación de dispositivos orgánicos basados en películas delgadas.

Se realizó también un trabajo de nanoestructuración de estas bicapas, en colaboración con el grupo LANAMAP del Instituto de Química Física Blas Cabrera. Se han establecido las condiciones de formación de estructuras periódicas mediante irradiación por láseres pulsados.

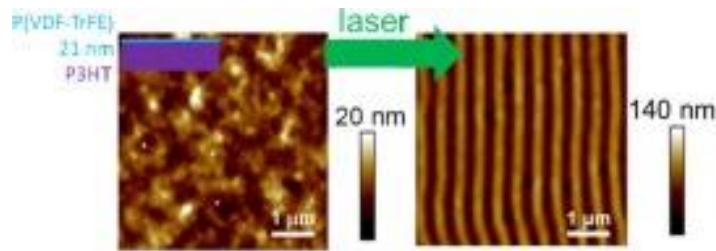


Figura 1. Imágenes de Microscopía de Fuerzas Atómicas (AFM) de una bicapa polímero semiconductor (P3HT)/polímero ferroeléctrico P(VDF-TrFE) (Izda.) y tras su estructuración mediante procesado láser (Dcha.).

DESARROLLO DE UN NUEVO CONCEPTO DE LITOGRAFÍA DE NANOIMPRESION ASISTIDA POR IMPRESIÓN 3D (3DPrANIL).

La fabricación aditiva usando filamentos de polímero fundido, comúnmente conocida como impresión 3D, es un procedimiento que encuentra muchas aplicaciones en la actualidad. Por el contrario, el nanoestructurado de polímeros mediante técnicas nanolitográficas juega un papel importante en la obtención de superficies y recubrimientos funcionales para aplicaciones en diferentes campos, incluida la micro y la nanoelectrónica. Hemos demostrado que al emplear la impresión 3D convencional, es posible fabricar superficies de polímeros nanoestructurados de una manera relativamente simple utilizando enfoques similares a los utilizados en la litografía de nanoimpresión (NIL), pero sin la necesidad de condiciones de sala limpia. Para ello, se ha desarrollado y probado un concepto de litografía de nanoimpresión asistida por impresión (3DPrANIL) para diferentes tipos de plantillas de polímero y silicio. Hemos demostrado que una plantilla hidrófila nanoestructurada polimérica se puede replicar con precisión en otro polímero, generando una superficie nanoestructurada con hidrofobicidad mejorada. Los resultados respaldan 3DPrANIL como método novedoso para obtener superficies micro y nanoestructuradas con diferentes funcionalidades como iridiscencia e hidrofobicidad.

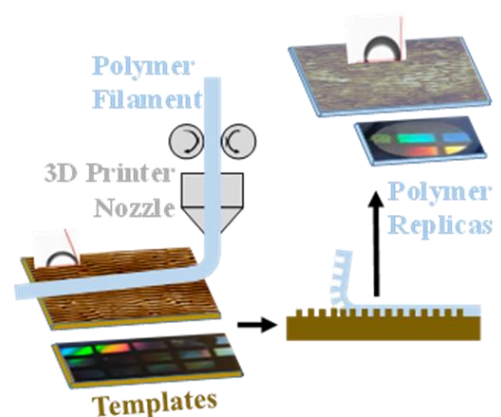


Figura 2. Vista esquemática del concepto de litografía de nanoimpresión asistida por impresión 3D (3DPrANIL): Mediante impresión 3D se deposita un filamento de polímero fundido sobre un sustrato estructurado. En condiciones convenientes la estructura del sustrato se puede replicar de manera eficaz en el polímero solidificado.

ACTIVIDADES EN COLABORACIÓN CON EL SINCROTRÓN ESPAÑOL ALBA

Propuesta de una nueva línea experimental para ALBA II

Se ha propuesto una nueva línea experimental (BRISA) para su construcción tras la renovación que tendrá lugar en el sincrotrón español durante los próximos años. La línea propuesta consta de dos estaciones experimentales, ambas son microscopios de rayos X blandos, focalizados con ópticas reflectantes para obtener haces nanofocalizados. Una de las estaciones experimentales (BRISA E1) abordará cuestiones relacionadas con la producción y el almacenamiento de energía, la sostenibilidad medioambiental y la salud, mientras que la otra estación (BRISA E2) se centrará en el desarrollo de una transformación digital sostenible.

Implementación de un dispositivo experimental para medidas simultáneas de la estructura, propiedades mecánicas y fluorescencia en el sincrotrón ALBA

Se ha implementado un espectrofotómetro de fluorescencia para el estudio in-situ de la fluorescencia emitida, simultáneamente a los cambios en las características estructurales mediante SAXS/WAXS, de películas de fibroína de seda sometidas a deformación en tracción. Los experimentos se han realizado con éxito en la línea NCD-SWEET del sincrotrón ALBA.

Grupo de BIOFISICA DE SISTEMAS MACROMOLECULARES (BIOPHYM)

Aspectos generales de la investigación

Nos hemos adentrado en las actividades experimentales y de simulación en el proyecto "Eco-Diseño de Polímeros de Envases de Productos Básicos mediante Modelado Multiescala Validado (EcoPOL)", concedido por el MCINN a mediados de 2020. Asimismo, hemos iniciado actividades colaborativas en el marco de dos proyectos de investigación de Transición Ecológica y Digital (TED), uno de ellos con la Universidad Rey Juan Carlos y el IMDEA Energía, y el otro con la Estación Experimental del Zaidín del CSIC (Granada) y la Universidad de Sevilla. Ambos proyectos se centran en el ámbito del reciclaje de polímeros y el desarrollo y caracterización de biopolímeros de origen natural. También se han obtenido resultados en el proyecto de estudio de tratamientos para el cáncer de mama metastásico con anticuerpos monoclonales, llevado a cabo bajo un contrato con la Fundación Hospital Vall d'Hebrón. Se ha establecido un nuevo contrato de investigación con la Fundación "Contigo contra el cáncer de mama", en el estudio "in silico" de anticuerpos monoclonales conjugados. Además, se han desarrollado dos contratos de colaboración con la empresa internacional Total Energies. Destaca también la actividad llevada a cabo en colaboración con investigadores del ICTP, la UAH y la UPV/EHU. A continuación, se describen las principales actividades y resultados obtenidos en los diferentes proyectos.

Editorial para el número especial "En memoria de Javier Martínez-Salazar" en Polymer (Elsevier)

Hemos editado un número especial en la revista Polymer Journal (Elsevier) con 4 artículos destacados y 14 artículos regulares en memoria de nuestro difunto colega Javier. El profesor Javier Martínez-Salazar obtuvo su doctorado en Física de la Universidad Autónoma de Madrid en 1979. Su tesis se dedicó a la aplicación de difracción de rayos X en el estudio de polímeros semicristalinos. Muchos de los resultados fueron revisados en un libro clásico de

Física de Polímeros (B. Wunderlich en "Macromolecular Physics", vol. 3, 1980). Durante su período posdoctoral, colaboró con el grupo del profesor Andrew Keller en el Laboratorio de Física H.H. Wills en Bristol (1979-1983), donde realizó contribuciones significativas relacionadas con la auto-nucleación en polímeros semicristalinos, contribuyendo a una nueva línea de investigación que tuvo un impacto profundo en el campo. El profesor Martínez-Salazar también fue pionero en la aplicación de la luz de sincrotrón a polímeros y visitó el Laboratorio Daresbury poco después de su puesta en marcha a principios de los años ochenta para abordar las primeras etapas del crecimiento cristalino durante la cristalización de polímeros. Ha sido una figura esencial en el funcionamiento tanto del IEM como del CSIC durante los últimos 30 años.

Polímeros sostenibles para la economía circular

Mezclas de polímeros de óxido de polilimoneno/ácido poliláctico procesadas por fusión

En este trabajo, se ha optimizado la polimerización del óxido de limoneno (LO) a temperatura ambiente con dos catalizadores diferentes a base de aluminio [AlMeX{2,6-(CHPh₂)(2)-4-Bu-t-C₆H₂O}] (X = Me (1), Cl (2)). Mediante la síntesis biobasada de un éter, el óxido de polilimoneno (PLO), con bajo peso molecular y buena estabilidad térmica. Este bioéter es un potencial aditivo sostenible para otros polímeros biobasados y biodegradables, como el ácido poliláctico (PLA). Por lo tanto, exploramos su capacidad para influir en las propiedades térmicas, mecánicas y morfológicas del PLA al preparar mezclas procesadas por fusión. La adición de una pequeña cantidad de PLO provocó una disminución de casi 10 °C en la temperatura de transición vítrea del PLA. Además, se observó una disminución en la temperatura de fusión del PLA y en el grado de cristalinidad. Interesantemente, se notó un aumento notable en la flexibilidad de las películas a base de PLA. Todos los resultados señalan la existencia de interacciones fuertes entre los componentes, sugiriendo una miscibilidad parcial. Este trabajo se ha realizado en colaboración con la UAH.

Síntesis de polimirceno y polianetol y aplicación como aditivos sostenibles para el ácido poliláctico (PLA)

La sustitución de plásticos derivados de combustibles fósiles por otros obtenidos a partir de recursos biobasados, que presenten un rendimiento adecuado para ser utilizados como plásticos de consumo, es actualmente un campo importante de investigación, dada la necesidad urgente de pasar de una economía basada en combustibles fósiles a una más sostenible. En este contexto, el trabajo se centra en la aplicación de un sistema catalítico basado en complejos de titanio de silsesquioxano-ciclopentadienilo para la preparación de polímeros biobasados, que pueden usarse como aditivos para mejorar las deficientes propiedades materiales de un polímero biodegradable como el ácido poliláctico (PLA). Estos complejos de titanio, cuando se activan con metilaluminoxano o con sales de triflato, demuestran ser capaces de polimerizar dos monómeros biobasados: mirceno y anetol. Es destacable que las polimerizaciones con estos dos monómeros distintos tienen lugar a través de mecanismos diferentes. Los polímeros resultantes, polimirceno (PM_y) y polianetol (PAN), se han aplicado como modificadores para el PLA. Las mezclas binarias de PM_y y PLA mostraron una disminución considerable en la temperatura de transición vítrea y la promoción de la cristalización del PLA para un contenido de PM_y por debajo del 15%. Las propiedades mecánicas de las mezclas PLA/PM_y también mostraron plasticización, con una disminución del módulo elástico y una plasticidad mejorada, lo que resultó en sistemas

menos frágiles en comparación con el PLA puro. El análisis morfológico indicó un sistema parcialmente miscible, separado por fases con dominios de tamaño micrométrico. En cambio, el PAN inhibió completamente la cristalización del PLA y las mezclas PLA/PAN fueron inmiscibles, pero bien dispersas, obteniéndose un sistema separado por fases en la preparación de películas por fundición con disolvente con dominios PAN muy pequeños. Las mezclas mostraron un módulo de tracción más alto que el PLA puro y ausencia de comportamiento plástico, lo que resultó en sistemas más frágiles al agregar PAN al PLA. Este trabajo se ha llevado a cabo en colaboración con la UAH.

Polímeros con nuevas aplicaciones: textiles conductores

La combinación de tereftalato de polietileno (PET), uno de los polímeros más utilizados en la industria textil, con grafeno, uno de los materiales conductores más destacados en los últimos años, representa una estrategia prometedora para la preparación de textiles conductores. Este estudio se centra en la preparación de textiles poliméricos mecánicamente estables y conductores, y describe la preparación de fibras de PET/grafeno mediante el método de hilado en seco-humedo por chorro desde soluciones de nanocompuestos en ácido trifluoroacético. Los resultados de nanoindentación muestran que la adición de una pequeña cantidad de grafeno (2% en peso) a las fibras vítreas de PET produce un aumento significativo en el módulo y la dureza ($\approx 10\%$) que puede atribuirse en parte a las propiedades mecánicas intrínsecas del grafeno, pero también a la promoción de la cristalinidad. Se encontró que cargas más altas de grafeno hasta un 5% en peso producen mejoras mecánicas adicionales de hasta $\approx 20\%$, que se pueden atribuir simplemente a las propiedades superiores del material de carga. Además, las fibras de nanocompuesto muestran un umbral de percolación de conductividad eléctrica superior al 2% en peso, alcanzando ≈ 0.2 S/cm para la mayor carga de grafeno. Por último, los ensayos de flexión en las fibras de nanocompuesto muestran que la buena conductividad eléctrica se puede conservar bajo carga mecánica cíclica. Este trabajo se ha realizado en colaboración con el ICPT (CSIC).

Biofísica de sistemas macromoleculares

Biofísica de anticuerpos monoclonales para el cáncer de mama

Se ha estudiado la afinidad de unión de trastuzumab y pertuzumab a HER2 utilizando métodos experimentales e in silico. Los experimentos se realizaron utilizando los anticuerpos en su forma completa de IgG, tal y como se utiliza en la terapia clínica, y el dominio extracelular de la proteína HER2 en solución. Este enfoque proporciona una visión precisa, reproducible y confiable de la interacción entre ellos en condiciones fisicoquímicas similares a las que se encuentran en el entorno tumoral. Se utilizaron dispersión dinámica de luz y cromatografía de exclusión molecular acoplada con tetradetección para caracterizar los complejos proteicos, medir sus concentraciones y calcular la energía de unión libre de equilibrio, ΔG_{bind} . Además, se empleó PRODIGY, un modelo tipo QSAR con excelente capacidad predictiva, para obtener estimaciones in silico de ΔG_{bind} . Los resultados obtenidos indican que pertuzumab presenta una afinidad de unión ligeramente mayor a HER2 que trastuzumab. La diferencia en la afinidad de unión se explicó en función de la contribución de diferentes descriptores de contacto interfacial (IC) al valor de ΔG_{bind} estimado por el modelo PRODIGY. Además, los experimentos revelaron que el anticuerpo IgG de pertuzumab se une preferentemente a dos proteínas HER2, una por fragmento Fab, mientras que trastuzumab forma principalmente un complejo monovalente. Este hallazgo se interpretó

en función de un modelo geométrico que identificó el hacinamiento estérico en el complejo trastuzumab–HER2 en comparación con el complejo pertuzumab–HER2.

Estudio microrreológico de lágrima humana y artificial

Este estudio investiga las propiedades viscoelásticas de los fluidos biológicos, incluyendo tanto las lágrimas humanas como lagrimas artificiales (colirios) que contienen ácido hialurónico, mediante microrreología pasiva. Al seguir el movimiento browniano de partículas trazadoras de diversos tamaños en los fluidos, pudimos sondear sus propiedades viscoelásticas. Los resultados mostraron que las propiedades viscoelásticas de las lágrimas artificiales, como la viscosidad newtoniana y el tiempo de relajación, se escalan según la concentración y el tamaño macromolecular del ácido hialurónico, asemejándose a soluciones semidiluidas no entrelazadas. Además, se descubrió que las lágrimas humanas tienen una viscosidad un 50% mayor que la del agua pura, comparable a las lágrimas artificiales que contienen un 0.1% de ácido hialurónico, pero con un tiempo de relajación un orden de magnitud más largo que las soluciones oftálmicas. Este comportamiento se atribuyó a su composición intrincada. El aspecto distintivo de este estudio radica en demostrar la viabilidad de medir las propiedades reológicas de las lágrimas humanas, un biofluido de gran interés, utilizando volúmenes de muestra extremadamente pequeños y microrreología. Esto proporciona información completa a lo largo de un amplio rango de frecuencias, acercándose a aquellas correspondientes al parpadeo al aplicar la regla de Cox–Merz. Estos hallazgos son de gran valor, ya que allanan el camino para futuras investigaciones sobre pequeños volúmenes de lágrimas de pacientes oftálmicos. Este trabajo se ha hecho en colaboración con el POLYMAT (UPV/EHU), el Hospital de Donostia y la clínica Begitek.

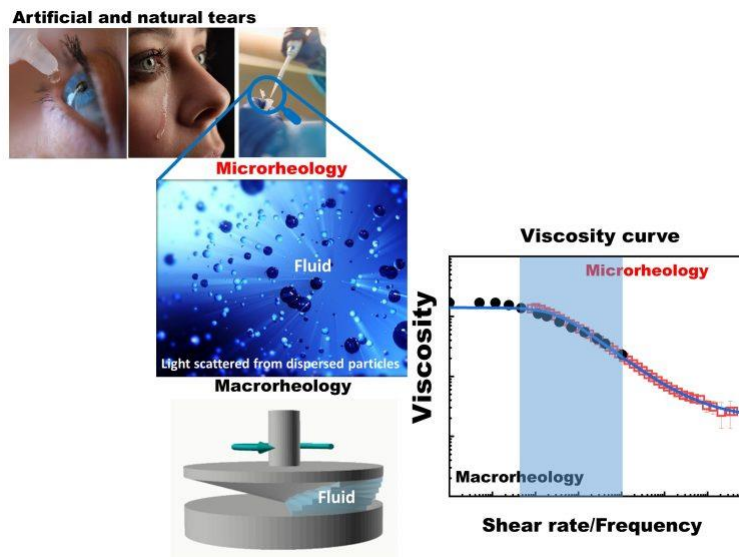


Figura 3. Exploring the properties of minute liquid volumes, such as tears and eye drops, demands innovative methodologies. In this study, researchers fused two established techniques and tailored them for microscale applications: dynamic light scattering (DLS), a method that involves illuminating liquids to observe the scattering of light off suspended particles, and rheological approaches, which assess the viscosity and stress resistance of liquids by inducing flow under various geometries like plates or cones.

CHAPTER 2B – RESEARCH ACTIVITIES

THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Gravitation and Cosmology.
- Condensed Matter Theory.
- Theoretical Nuclear Physics: Structure and Reactions.
- Theoretical molecular physics applied to the study of astrophysical species and to the characterization of atmospheric pollutants.

RESEARCH SUBLINES:

- Loop Quantum Gravity and Cosmology.
- Classical and Quantum General Relativity.
- Black Holes Physics.
- Non-Local Quantum Gravity.
- Gravitational waves.
- Classical and quantum field theory.
- Electroweak processes in nuclei.
- Nuclear structure from a selfconsistent correlated mean field approach.
- Three-body techniques in Nuclear Physics.
- Reactions of relevance in Nuclear Astrophysics.
- Theoretical spectroscopy applied to the study of relevant astrophysical and atmospheric non-rigid molecules.
- Formation of volatile organic compounds from organic radicals.
- Photodissociation of organic radicals.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Theoretical and mathematical physics.
- Computational methods.
- Perturbative field theory.
- Geometric methods in the Hamiltonian analysis of field theories.
- Selfconsistent mean field calculation techniques.
- Numerical methods to solve the Faddeev equations in coordinate space.
- Hyperspherical adiabatic expansion method.
- Highly correlated ab initio calculations and new computational tools.

RESEARCH ACTIVITY:

GRAVITATION AND COSMOLOGY

Loop Quantum Cosmology

The Gravitation and Cosmology Group at IEM has contributed innovative research to the advance of Loop Quantum Cosmology. We have obtained results on two fronts: predictions for the primordial spectrum of cosmological perturbations and a quantum description of black hole spacetimes.

With respect to cosmological perturbations, we have obtained impressive analytical approximations to the primordial power spectrum both for tensor and for scalar perturbations. These approximations have been reached using our proposal for the choice of a vacuum state for the perturbations. This proposal selects the most natural state in Loop Quantum Cosmology, well adapted to cosmological evolution, without artificial superimposed oscillations that would pump power into the spectrum. This non-oscillating vacuum presents a physical scale that is of the Planck order around the bounce that occurs in Loop Quantum Cosmology, but which then evolves like the rest of the physical wavelengths. We have checked that the analytical approximations give outstanding good fits to the numerical results. The main physical effect of the quantum bounce is the suppression of power at large angular scales, a fact which alliviates and/or solves the tensions between cosmological observations and the predictions of the standard cosmological model frequently used in General Relativity.

In the case of black holes, we have achieved the first complete and consistent quantization of the interior geometry for a model recently proposed in Loop Quantum Cosmology to effectively incorporate quantum effects without significantly modifying the horizon surroundings, but curing the essential singularity. Our quantization chooses a suitable habitat for the solutions to the Hamiltonian constraint and thus provides a continuum spectrum of black hole masses in the physical sector. To develop a perturbative formalism around these quantum black holes, we have discussed the introduction of a linear scalar field and investigated how to arrive at a well defined quantum field theory in which the concept of vacuum and particle is fixed by reasonable physical criteria. We have proved that this is possible by imposing that, once a part of the field evolution is separated by attributing it to the background, the resulting Heisenberg dynamics can be implemented as a unitary quantum transformation. In this way, we can select a privileged quantization of the field. We plan to combine our results to obtain a quantum model that could be used to describe gravitational radiation emitted by black holes, with connections to gravitational wave astrophysics.

Non-local quantum gravity

One of the main activities of the Gravitation and Cosmology group is the study of perturbative quantum theories of the gravitational interaction. In general, traditional local models with higher-order derivatives are not unitary, but we showed that there is a notable exception to this rule; namely, when ghost modes are paired into complex conjugate poles. In this case, such modes do not appear in the physical spectrum of the theory. On the other hand, the presence of non-local operators in the field action allows one to solve the unitarity problem by eliminating ghost modes completely or by reducing them to purely virtual particles. In 2023, we have obtained few results in this research topic, but of high quality. In

the case of non-local quantum gravity with asymptotically polynomial operators, we have formulated a gravity-matter non-minimally coupled version and showed in detail its super-renormalizability or finiteness. When finite, this theory is invariant under Weyl symmetry both at the classical and the quantum level. We are presently exploring the phenomenological consequences of this property. On the other hand, we have finally reached a formulation of a perturbative quantum gravity with fractional operators, a goal sought for since 2010 and completely motivated in terms of geometric properties of spacetime associated with a good ultraviolet behaviour. The theory turns out to be super-renormalizable or even finite and, moreover, it is unitary at least at the tree level. Physical modes are not pointwise particles (propagators with poles) but gases of quasi-particles (propagators with branch cuts). Currently, we are studying the cosmological consequences of the theory.

Gravitational waves

The Gravitation and Cosmology group is one of the external groups of the LISA Consortium and is composed by one full and one associate member, plus an external associate. The year 2023 has been characterized by the closure of the so-called phase B1 according to ESA nomenclature, and by the definition of the ultimate scientific goals of the mission. We have contributed to this effort with a “white paper” of the Cosmology Working Group, which has already received more than 200 citations. Our results were focused on the cosmological stochastic gravitational-wave background and on the capability of LISA to detect an imprint of gravity beyond Einstein’s theory. The very recent adoption of LISA by ESA and its entrance in phase B2 (implementation) will mark an increase of the group’s activities in this sector. In parallel, as members of the Einstein Telescope (ET), we have performed a model-independent study on the possibility to detect logarithmic oscillations in the gravitational-wave background both with the ET and with LISA and DECIGO. Such oscillations can have different origins, among which we highlighted a discrete symmetry of spacetime geometry that can arise in scenarios of quantum gravity. These results will enter the Blue Book of the observatory, presently under writing.

Geometric methods in gravitation

Among the activities carried out by the Gravitation and Cosmology Group in the study of mathematical aspects of the Hamiltonian formulation of field theories, in particular gravity, during this year we have completed the rigorous study of the self-dual action in the context of the geometric Gotay-Nester-Hinds (GNH) formalism and the study of some functional analytic issues for generic field theories.

The Hamiltonian analysis of the self-dual action is not a particular case of the one corresponding to the Holst action because of degeneracy issues associated with certain operators that become projectors for the choices of the Immirzi parameter that select the self-dual or anti-self-dual action from the one-parametric family of Holst actions. A consequence of this is that the Hamiltonian analysis in any of its flavors (i.e. by using the Diract or GNH approaches) cannot be adapted to the self-dual case; a completely new analysis starting from scratch is necessary. When this is performed, the critical last consistency step (tangency of the Hamiltonian vector fields to the secondary constraint submanifold) demands the introduction of quite sophisticated methods. We have solved this problem completely and, as a side result, we have found an explicit reduction procedure that gives rise to the Ahtekar

formulation for gravity without the use of any gauge fixing. This result will be published next year.

Functional analytic issues in the formulation of field theories have been understood and studied for quite a long time. However, and despite the fact that the ensuing results have been known within the mathematical community, they have not percolated to mainstream theoretical physics. They are perceived as a fine print of sorts necessary for the rigorization of some problems but lacking any physical consequences. In reality this is quite a paradoxical point of view because field theories, and very specially, quantum field theories are plagued with mathematical inconsistencies for which there are practical ways out but little deep understanding. Even such systems as the free scalar field are non-trivial from the perspective of functional analysis. For instance, despite first appearances, they are singular and, hence, their Hamiltonian description is non-trivial. Even worse, the popular Dirac approach cannot be used because the primary constraint submanifold (the image of the fiber derivative) is dense in the phase space and, consequently, cannot be represented by the null set of any continuous function. During the last year we have adapted the GNH method to deal with this situation and obtained a detailed, rigorous description that takes into account all the necessary functional issues. Our hope is that this will allow us to quantize this model and perturbations of it without encountering regularization or renormalization issues. We have recently completed a paper on this subject that will be published during 2024.

CONDENSED MATTER THEORY

[Nematic and Kekulé orders in twisted bilayer graphene](#)

Twisted bilayer graphene displays distinctive features, since its superconductivity exhibits a nematic character which is absent in the case of twisted trilayers, quadrilayers and pentalayers. Moreover, the superconductivity of twisted bilayer graphene may coexist with insulating or metallic phases, depending on the screening environment. Thus, during the past year we have been working towards a comprehensive map of the phase diagram of twisted bilayer graphene, which shows great complexity as a reflection of the sensitivity of the material to slight variations of the experimental conditions. At a first stage, we have taken advantage of the fact that hydrostatic pressure can induce flat bands in twisted bilayer graphene at twist angles larger than those realizing the usual magic-angle condition. We have characterized the emerging phases at even integer filling factors, relying on an exact real-space self-consistent Hartree-Fock approach that accounts for the screened long-range Coulomb interaction as well as for the on-site Hubbard interaction. We have complemented our real-space resolution with the evaluation of order parameters that define the valley-polarized and intervalley-coherent phases, that are known to be prominent candidates for the correlated phases observed experimentally.

We have looked for signatures of nematicity in the twisted bilayer under pressure, where the number of atoms per moiré unit cell is much reduced (down to ~ 1000). In these conditions, the self-consistent Hartree-Fock resolution can be carried out exactly, including all the bands in the model. We have seen that, over a certain window of couplings in the hole-doped regime, the twisted bilayer falls into a phase with breakdown of the C_3 rotational symmetry down to a simple mirror symmetry. This is consistent with the nematicity observed by the group of Pablo Jarillo at MIT, and it sheds light about the screening conditions leading to this particular feature of twisted bilayer graphene. Moreover, we have also seen that there is complementarity between the nematic phase, which is always supported by a valley-

polarized state, and a different regime with Kekulé charge-density-wave order, which is the signature of intervalley coherence. These findings may be relevant to reconcile the observations of nematicity with recent scanning tunneling microscopy experiments which have revealed the presence of Kekulé order in other setups of magic-angle twisted bilayer graphene.

Our goal is to carry out a search of similar features but in real twisted bilayer graphene, where the number of atoms in the moiré unit cell is $\sim 10,000$. For this purpose, we have set up a self-consistent Hartree-Fock resolution making heavy use of parallelization techniques, which will allow us to implement an exact Hartree-Fock method including all the bands in the model. This may require large computational resources, with codes already making use of up to 1 TB of RAM, in an effort to clarify definitely the question of nematicity and the origin of superconductivity in twisted bilayer graphene.

Floquet Engineering

The possibility of control by an external periodic field has led to the concept of Floquet engineering where the parameters of a quantum system are tuned by an external driving. Floquet engineering has been successfully implemented in ultracold atoms, where the modulation is introduced by shaking the underlying optical lattice. The realization of the Floquet technique in solid state systems is a challenging but fruitful area. More specifically, Floquet engineering of topological systems has become a promising way of harnessing the topological properties of quantum materials. In this case, the modulation is performed by external electromagnetic radiation, and to achieve the high driving amplitudes required, ultrashort laser pulses are used. However, Floquet theory requires strict time periodicity of the control field and the usefulness of the concept of Floquet control has been put into question. We study the Floquet fidelity of Dirac electrons subject to linearly and circularly polarized beams. We apply our results to the surface states of Bi₂Se₃ with trigonal warping. Even with very short pulses of a duration of only a few cycles we find high Floquet fidelities pointing to the possibility of using short pulses for effective Floquet engineering.

THEORETICAL NUCLEAR PHYSICS

Electron scattering from polarized nuclei.

Elastic electron scattering from oriented odd-A axially deformed nuclei has been studied in the plane-wave Born approximation. The nuclear structure is described within a microscopic self-consistent Skyrme deformed Hartree-Fock approximation with pairing correlations. The interference form factors between monopole (C0) and quadrupole (C2) Coulomb terms that characterize the nuclear response with polarized nuclear targets are shown to increase or decrease the unpolarized cross-section, depending on the sign of the quadrupole deformation. By experimentally exploring the effect of this nuclear response, valuable insights into the sign of the quadrupole deformation can be obtained.

To illustrate the potential magnitude of those effects, specific instances with different ground-state spins and parities and with different types of deformation are presented. Namely, ²³Na ($I^\pi=3/2^+$), ²⁵Mg ($I^\pi=5/2^+$), and ⁵⁹Co ($I^\pi=7/2^-$). The important point is that joint measurements of both the unpolarized and the polarized cross-sections allow one to obtain a model-independent signature of the oblate or prolate deformation character of the nuclear shape. This information is based on the simple observation of whether the cross-section is increased or decreased by polarizing the target nucleus. The magnitude of this deviation is

related with the magnitude of the quadrupole deformation in a model-dependent way. Although the amplitude of this effect could depend on the specific nuclear model considered, the constraints made in this study do not change the conclusions concerning the feasibility of getting observables that exhibit sensitivity to the C0/C2 interference and therefore, to the sign of the axial deformation in odd-A nuclei. The nuclear spin in the electron scattering processes determines the number of multipoles contributing to the total form factor. While the primary focus of this work centers on the C0/C2 interference, a broader investigation considering higher multipolarities allowed by the nuclear spin, may reveal additional interferences. Furthermore, the nuclear spin also determines to a large extent the magnitudes of the geometrical factors that determine the weights of the interference contributions to the total form factor. Conversely, the parity of the nuclear state has no significant influence in this context. The study encompasses nuclei with different atomic and mass numbers. These numbers play an important role to understand the nuclear size and, specifically, the radius of the nuclear charge. The latter exhibits a direct correlation with the first minimum of the cross section, which undergoes compression with increasing radius. Future research should address other important issues, including the investigation of inelastic reactions, the new effects introduced by the use of polarized electrons, and the impact of the electron Coulomb distortion on the cross-section.

Confinement of two- and three-body systems by an external field

All along this year we have used the recently developed d-method to investigate two- and three-body systems under the influence of an external confining potential. Within this method, the dimension d is taken as a parameter, which can vary continuously from $d=3$ to $d=2$. The effect of the confining potential is then contained in the d -dependent centrifugal barrier. This method is precise and correct in the two limits, i.e., for $d=3$ and $d=2$.

In particular, for two-body systems we have investigated wave functions, phase shifts, and elastic cross sections. The two-body interaction is assumed to be short-range. Using a square-well potential, we have derived analytic expressions for scattering lengths and phase shifts. We have also introduced the critical dimension, d_E , which corresponds to the squeezing scenario such that the two-body scattering length is equal to infinity. This is the situation where the Efimov effect can show up after addition of a third particle. We have given explicitly the equivalent continuum wave functions in d and ordinary three-dimensional space, and show that the phase shifts are the same in both methods. Consequently, the d -method can be used to obtain low-energy two-body elastic cross sections in an external field.

Following the same scheme, we have also investigated the case of three-body systems, focusing as well on the continuum structures of three short-range interacting particles in a deformed external field. We focus on dimensions close to the critical dimension, $d = d_E$, between 2 and 3, defined by zero two-body energies, where the Efimov effect can occur. We have then designed for this dimension region a schematic, long-distance realistic, square-well based, three-body spherical model, which is used to derive analytic expressions for the wave functions, scattering lengths, phase shifts, and elastic- scattering cross sections. The procedure and the results are universal, valid for all short-range potentials, and for large scattering lengths. We have discussed as well the properties and validity of the derived expressions by means of the simplest system of three identical bosons. We have found that the derived expressions are particularly useful for very small energies, where full numerical calculations are often not feasible. For energies where the numerical calculations can be

performed, a good agreement with the analytic results is found. These model results may be tested by scattering experiments for three particles in an equivalent external deformed oscillator potential. The cross sections all vanish in the zero-energy limit for $d < 3$ with definite d -dependent power of energy.

Beta-decay of two-neutron halo nuclei

During this year we have also investigated the beta decay of two-neutron halo nuclei. More specifically, we have developed a novel and practical few-body method that is formulated in order to include isospin symmetry for nuclear halo structures. The method is designed to describe beta decay, where the basic concept of isospin symmetry facilitates a proper understanding. Both isobaric analogue and anti-analogue states are treated. We have derived general and explicit formulas for three-body systems using hyperspherical coordinates. The example of the beta decaying ^{11}Li ($^9\text{Li}+n+n$) is chosen as a challenging application for numerical calculations of practical interest. The detailed results are compared to existing experimental data and good agreement is found at high excitation energies, where the isobaric analogue and anti-analogue states are situated in the daughter nucleus. An interpretation of the decay pattern at lower excitation energies is suggested. Decays of the ^9Li -core and the two halo-neutrons are individually treated and combined to the daughter system with almost unique isospin, which we predict to be broken by about 0.4% probability. Properties of decay products are predicted as possible future tests of this model.

THEORETICAL SPECTROSCOPY APPLIED TO THE STUDY OF RELEVANT ASTROPHYSICAL AND ATMOSPHERIC NON-RIGID MOLECULES.

The research work carried out in 2023 is part of the project H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081 “Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)”. This project is coordinated in the Institute of Structure of Matter by the Theoretical Chemistry group of the Department of Theoretical Chemistry and Physics in collaboration with the Associated Unit with the University of Huelva.

ATMOS is an H2020 international network funded by the Marie Curie Action for Research Cooperation (RISE). The main objective is the study of scientific problems related to the elements of atmospheric pollution, with emphasis on the training of graduate students in atmospheric sciences. The network is composed of twelve scientific groups and 31 senior scientists. Within this frame, several students and professors from the groups integrated in ATMOS have visited the IEM-CSIC. During 2023, the group from the University of Agadir, led by S. Dalbouha, former PhD student at the IEM-CSIC, joined the network.

ATMOS focuses on species abundant in the atmosphere, oxygenated volatile organic species (OVOC's) and organic radicals. Basically, the scientific work of the IEM participants refers to the identification and reactivity of organic radicals and OVOCs that present internal rotation. It is assumed that the understanding of processes involving organic compounds in the atmosphere depends on their identification and characterization. Line-by-line quantitative spectroscopic modeling in the infrared (IR) range is necessary for current and future atmospheric observations with large-scale instruments. To understand the effects on the atmosphere, structural and spectroscopic parameters are needed. These studies require a great scientific effort focused on the characterization of known and new species and on the knowledge of chemical evolution, induced photochemical processes and radical cycles. At

the IEM, the main tool for molecular characterization are the highly correlated ab initio calculations, as well as the Original Fortran codes for the determination of spectroscopic properties. It collaborates with the laboratories of the Department of Molecular Physics.

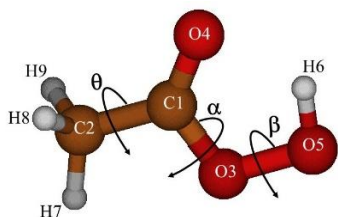


Fig 1

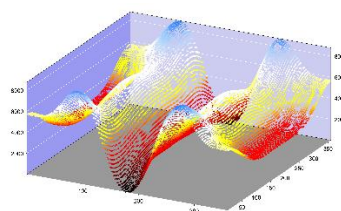


Fig 2

ATMOS is targeted for spectroscopy, reactivity, and gas-gas and gas-solid interactions involving air pollutants. The modelling of molecular solids for the capture and storage of pollutants is addressed. During 2023, nitrophenol absorption pre-occupancy on activated carbon has been studied. Nitrophenols are produced in the combustion of engine fuels.

During 2023, spectroscopic and structural properties have been calculated, with an emphasis on the internal rotation of methyl groups, alcohols, ethers and ketones that are classified as Volatile Oxygenated Organic Compounds. These species contribute to an increase in tropospheric O₃. Highly correlated ab initio calculations and original software are employed. Acetone and biacetyl have been studied theoretically an

d through Raman. The latter in collaboration with the Department of Molecular Physics. Isopropyl alcohol, methoxymethanol, hydroxyacetone, and some peroxides have been theoretically studied (CH₃COOOH (Figs 1 and 2), CH₃OOCH₃). Some of these volatile species have been detected in gaseous sources in the interstellar medium.

NUCLEAR, VIBRATIONAL AND DISORDERED MEDIA SPECTROSCOPY DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

- Systems devoid of long-range order.
- Nano-Photonics.
- Plasmonics and Metamaterials.
- Surface-Enhanced Spectroscopy (SERS, SEF and SEIRA) of molecular systems
- Nanosensors.
- Spectroscopic techniques applied to the study of materials of interest for the Cultural Heritage.
- Design of ecomaterials.
- Toxicological analysis by spectroscopical techniques.
- Underwater Heritage.
- Experimental Nuclear Physics.
- Nuclear Structure studied at intermediate energies.
- Study of excited states and nuclear resonances.
- Nuclear Structure studied in reactions with stable and exotic nuclei at low, medium and relativistic energies.
- Study of exotic hyper-matter, mesonic nuclei and other bound states in the strangeness section of the nuclear Equation-of-State.
- Particle tracking and vertexing methods for high energy nuclear physics experiments.
- Research on machine and deep learning applied to experimental nuclear spectroscopy.
- Computing simulations using FairRoot and Geant4 for nuclear physics experiments at low, intermediate and relativist.

RESEARCH SUBLINES:

- Physical behavior at nano-scales.
- Microscopic structure and dynamic of disordered condensed matter.
- Localized Plasmon Resonances and Mie resonances in metal/dielectric nanostructures (nanoantennas).
- Metasurfaces with HRI dielectric materials: BICs.
- Topological Plasmonics.
- Nanofabrication and functionalization of plasmonic nanostructures.
- Plasmon-assisted spectroscopy characterization of biomolecules on nanostructures.
- Detection of pollutants by SERS.
- Analysis of colorants and pigments by normal vibrational spectroscopy and surface-enhanced vibrational spectroscopy.
- Theoretical calculations of molecular vibrational spectra.
- In situ material characterization studies.
- Sustainable cements.
- Underwater Heritage.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- Numerical simulation.
- Neutron Scattering.
- Gas adsorption techniques.
- Computational methods.
- Theoretical and mathematical physics.
- Dispersive Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform Raman spectroscopy (FTRaman).
- Portable Raman Spectroscopy.
- Fourier-Transform infrared spectroscopy (FTIR).
- Infrared Attenuated Total Reflectance (ATR).
- Fluorescence Spectroscopy.
- X-Ray Fluorescence (XRF).
- X-Ray Diffraction (XRD).
- Transmission Electron Microscopy (TEM).
- Scanning Electron Microscopy (SEM).
- Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX).
- Optical Spectroscopy (OM).
- Dark-Field Microscopy (DFM).
- Thermal Analysis (DTA/TG).
- Nuclear Magnetic Resonance (NMR).
- 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-FAIR.
- GEANT4 Monte Carlo simulation of experimental setup and detectors.
- Gamma spectroscopy.
- Analysis of experiments in experimental nuclear physics.
- Electronic and mechanical design of experimental setup.
- Spectroscopy of hypernuclei, and mesonic nuclei in relativistic energy ion collisions at FRS & SuperFRS at GSI-FAIR.
- Track and vertex reconstruction algorithms for data analysis of nuclear collisions.
- Pytorch deep learning architectures for particle tracking, classification and observable estimations.

RESEARCH ACTIVITY:

PHYSICAL BEHAVIOR AT NANOSCALES

Within our research regarding the adsorption of molecular hydrogen at cryogenic temperatures, in 2023, we have advanced in the experimental study and theoretical analysis of metastable behaviors in hydrogen adsorption. The appearance of metastability in the physisorption of hydrogen in porous materials, that is, hysteresis in isothermal adsorption/desorption cycles, is not a common phenomenon and in particular has never been observed in the case of carbonaceous materials. The few cases reported in the case of nanostructured carbons turned out to be caused by some type of chemisorption in the metallic

impurities present in the material. From the point of view of its practical application for hydrogen storage and management, physisorption is clearly preferable given its low energy barrier to hydrogen release. On the other hand, hysteresis itself is very interesting from a practical point of view since it would allow both lower working pressures for the same load (high pressure only during fuel loading) and better management of heat flows in the system. In 2023 we have focused again on a nanostructured material composed mainly of double-layer carbon nanotube bundles. More specifically, we have completed a first scientific article in which the metastable behavior of hydrogen adsorption is exposed and a study of both the structure of the system and the microscopic dynamics of the processes involved is carried out using neutron scattering techniques (publication accepted in Carbon journal). Likewise, we have advanced in the analysis of another battery of neutron scattering measurements that reveal a structural hysteresis in the adsorbent material associated with the hysteresis in the adsorption of hydrogen. We are also deepening in the understanding at the microscopic level of the phenomenon by comparing the measurements with numerical experiments. These studies are being carried out within a new collaboration with the Quantum Beams and Sustainable Materials research group led by Prof. Felix Fernández Alonso at the Materials Physics Center in San Sebastian.

Within the collaboration with the group of Prof. Leonor Chico at the Complutense University, we have completed an article (published in Carbon journal) on the surprising electronic structure of single-wall carbon nanotubes in their collapsed state. We had previously shown that a class of such systems represent a particularly useful example of what is known as one-dimensional Moire superlattices, presenting all the characteristics of their two-dimensional counterpart, the celebrated twisted bilayer graphene (TBG). The published article explains how the characteristic anomalous electronic behavior of TGBs occurs in all types of collapsed nanotubes, whether metallic or semiconductor.

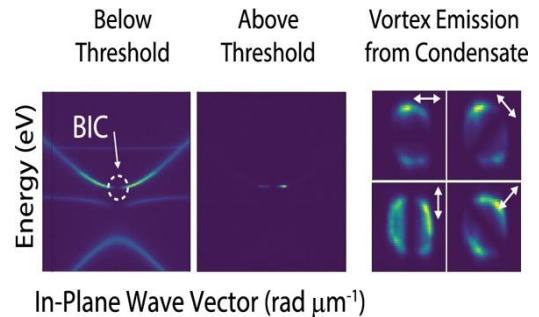
On the other hand, the one-dimensional Moire superlattices in these flattened nanotubes entail a superlattice of accumulation of electronic charge (eventually of “frozen” electrons in the nanotubes of suitable chiralities) in the “islands” of the Moire pattern. The adsorption of molecular hydrogen is strongly influenced by charge in excess. In particular, areas with positive charge strongly increase adsorption, as seen in graphite-potassium intercalates. Since Moire charge patterns appear in any type of collapsed nanotube, we have started a line of research, again in collaboration with the group of Prof. Felix Fernández, on the consequences that these charge superlattices can have on the physisorption of hydrogen in collapsed carbon nanotubes.

OPTICAL PROPERTIES OF METASURFACES: BOUND STATES IN THE CONTINUUM

We have continued our ongoing work on planar periodic arrays (metasurfaces) of resonant dielectric and plasmonic subwavelength structures with special emphasis on bound states in the continuum (BICs). BICs have attracted much interest lately in photonics for their (theoretically) infinite Q factor. These states are leaky modes that in a certain limit of some parameter space cannot couple to any radiation channel. In order to trap light in such nearly-zero-linewidth electromagnetic modes, a common approach is to exploit metasurfaces: outgoing specular channels can be suppressed by tuning the parameters of the system in various manners, leading to symmetry-protected BICs. On the basis of a generalized coupled

electric/magnetic dipole theory for infinite arrays, a variety of scenarios has been investigated where single/double meta-atoms can be simply described by a combination of various electric and/or magnetic dipoles. Our theoretical work has been developed in the framework of MICIN Project BICPLAN6G. Furthermore, we have demonstrated that:

- first experimental demonstration of room-temperature exciton–polariton (EP) condensation from a BIC, achieved by strongly coupling stable excitons in an organic perylene dye with the extremely long-lived, quadrupolar BIC in a dielectric metasurface of Si nanoparticles, characterized through our calculations. The long lifetime of the BIC, mainly due to the suppression of radiation leakage, allows for EP thermalization to the ground state before decaying. This property results in a condensation threshold 1 order of magnitude lower than the lasing threshold reported in similar systems in the weak coupling limit. In collaboration with groups of Sunshuke Murai (Kyoto University) & Jaime Gómez Rivas (Surface Photonics, Technical University of Eindhoven).



- first experimental evidence of strong electromagnetic field confinement along the lateral (out-of-plane) direction in a near lossless metasurface that supports a symmetry-protected Bound State in the Continuum was shown, which fully suppresses the radiative losses of resonant scatterers. This experimental demonstration, supported by our coupled dipole calculations, was carried out by the group of Jaime Gómez Rivas (Surface Photonics, Technical University of Eindhoven).

TOPOLOGICAL NANOPHOTONICS

In the last years there have been multiple proposals in nanophotonics to mimic topological condensed matter systems. However, nanoparticles have degrees of freedom that atoms lack of, like dimensions or shape, which can be exploited to explore topology beyond electronics. Elongated nanoparticles can act like projectors of the electric field in the direction of the major axis. Then, by orienting them in an array the coupling between them can be tuned, allowing to open a gap in an otherwise gapless system. As a proof of the potential of the use of orientation of nanoparticles for topology, we studied 1D chains of prolate spheroidal silver nanoparticles. We showed that in these arrays spatial modulation of the polarization allows to open gaps, engineer hidden crystalline symmetries and to switch on/off or left/right edge states depending on the polarization of the incident electric field. This opens a path toward exploiting features of nanoparticles for topology to go beyond analogues of condensed matter systems.



DESIGN OF NANOSENSORS FOR POLLUTANT DETECTION

The design of sensors based on nanostructures continued to be one of the main objectives of the experimental work of our group during the year 2023. These sensors require the synthesis of nanostructures with advanced optical properties. The interaction of light of an appropriate wavelength with nanoparticles (NPs) leads to a high enhancement of the local electric field, which is the fundamental principle on which molecular detection by Raman and fluorescence enhanced by nanostructures is based. In recent years we have developed various methods for the synthesis of nanoparticles with interesting applications in spectroscopy and catalysis. Among these nanoparticles are silver nanostars, which present specific morphological properties leading to high intensification of the electromagnetic field. The use of metal nanostars was generalized to the design of all the SERS sensors highly efficient in the detection of numerous substances of environmental and biological interest, as well as pigments with interest to the Cultural Heritage.

Furthermore, the design of nanosensors implies a modification of the physical-chemical properties of the nanoparticles through their functionalization. This functionalization can be achieved by self-assembly of organic molecules on nanostructures, which allows increasing the sensitivity and selectivity of the manufactured nanostructures, resulting in high performance surfaces by combining the physical properties of the metal with the chemical properties of organic molecules self-assembled on them. In this sense, various functionalization strategies based on the use of: a) calixarenes; b) cyclodextrins and c) molecules with a cruciform structure, were carried out.

Calixarenes are characterized by having an internal cavity within which molecules difficult to detect by nanostructure-enhanced Raman spectroscopy (SERS) can be housed. During 2023, the use of new generations of calixarenes, characterized by having different attachment points with metal surfaces in their structure, continued. These new assemblers were tested in the detection of emerging contaminants such as glyphosate, perfluorinated compounds and other neonicotinoid insecticides with devastating effects on the bee population such as thiacloprid, imidacloprid, acetamiprid and chlorothalonil. These studies were carried out within the framework of the cooperation that our group maintains with researchers from the PJ Safarik University of Kosice (Slovakia) and with the company Saftra Photonics and with the collaboration of the Playa Ancha University in Chile. This company has licensed the patent developed by our group on the detection of glyphosate.

Cyclodextrins have been used in the functionalization of nanoparticles for the detection of traces of other types of emerging contaminants such as bisphenols. The cyclodextrins used for this purpose need to incorporate thiol groups (-SH) in their structure that allow the anchoring of the macromolecule on the metal surface. Like the calixarenes, these molecules have an internal cavity with different characteristics that allow interaction with molecules that are difficult to adsorb on metals.

Likewise, new methodologies for manufacturing plasmonic nanoparticles have been developed in our group to be used in the detection of emerging contaminants of the phenoxy type, such as MCPA and 2,4-D, for which a modification of nanoparticles manufactured with citrate greatly improves its applicability. It has been seen that citrate modifies the morphology of silver nanoparticles, generating nanorods capable of shifting the plasmon resonance towards longer wavelengths.

PLASMONIC EFFECTS AND BIOMOLECULE ANALYSIS

The excitation of plasmons in nanostructured metals, mainly silver and gold, can be used in the study of biomolecules. This type of analysis allows a characterization of biomolecules at physiological concentrations, which allows their characterization at concentrations similar to the biological media where they are found.

The plasmonic effects analyzed were the following: a) localized surface plasmon resonance (LSPR); b) interparticle hybridization of plasmons, manifested through nanoparticle aggregation processes; and c) the intensification of the electric field induced fundamentally in the points of maximum field intensification located in interparticle spaces or gaps, and in tips generated in fabricated nanoparticles bearing an anisotropic morphology. This last effect is responsible for the SERS technique.

These effects present a promising application in the field of biophotonics. During 2023, different metal substrates have been used to carry out the study of the adsorption of peptides on nanoparticles. The adsorption of peptides allows the biofunctionalization of surfaces with the aim of designing biological sensors capable of detecting the presence of pathogens.

During 2023, the line of research based on the use of plasmonic nanoparticles for the analysis of complex biological systems has continued. Progress has been made in the study of lichens and fungi of different species. The first results are quite promising in the application of the SERS technique in the identification of different types of fungal species. Furthermore, much progress has been made in the study of polyphenolic molecules existing in plant tissues such as oak galls, substances that will be used in the biofunctionalization of nanoparticles with a view to being used in molecular detection.

A line of research initiated this year has been the development of plasmonic sensors for the detection of volatile organic compounds. These sensors involve the development of nanostructures that allow the immobilization and subsequent detection of gaseous molecules at low concentrations.

SPECTROSCOPIC TECHNIQUES APPLIED TO THE STUDY OF CULTURAL HERITAGE

The investigation of iron gall inks present in ancient manuscripts has continued during 2022 in order to make a discrimination of the different types of inks used in the same document or similar documents, where different inks used by several people can be analyzed. The main objectives of this work were: a) discrimination of iron gall inks in manuscripts written at the same time through the use of Raman, infrared and XRF spectroscopy; b) identification and assignment of the Raman spectral markers of similar writings and their correspondence with the chemical structure of the components; c) evaluation of the effect of aging on the spectral signals in order to find temporary spectral markers, which can contribute to knowing the approximate age of the writings and the possible subsequent modifications made to the manuscripts over time. This work is being completed with the manufacture of iron gall inks in our laboratory following the recipes found in ancient manuscripts, for later comparison with inks from the historical manuscripts.

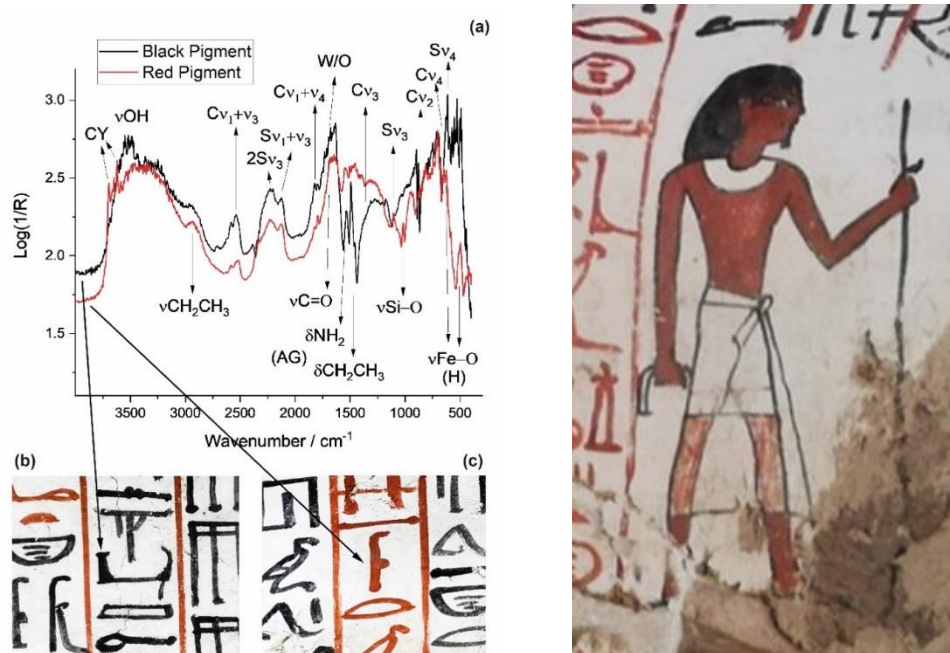
During this year, the analysis of the iron and copper complexes with different polyphenolic substances existing in iron gall inks has been deepened, and a theoretical study has been developed based on the analysis of the vibrational modes of different iron complexes of these polyphenols to help in the interpretation of the vibrational spectra of these substances of great importance for Cultural Heritage given their presence in historical manuscripts. The

results produced from this research will assist in the analysis of historical manuscripts that is intended to be carried out in the future in the National Library of Madrid and the Library of the Royal Palace of Madrid.

The application of Raman and FTIR spectroscopy in the analysis of materials contained in inks found in Egyptian burial chambers has been another of the tasks that have been developed in our group this year. This type of study implies great difficulty since it has to be carried out in-situ with portable instrumentation capable of being introduced into the burial chamber. Raman spectroscopy has been used in the analysis of the pigments contained in these inks. However, the presence of a high content of organic substances in them involved hard work on the interpretation of the results. Nevertheless, the DRIFT (Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform) technique has allowed the in-situ characterization of these inks, although the most intense signals come in this case from the dispersing and binding materials. However, DRIFT spectra have provided important information on the content of materials such as calcite, gypsum, animal glue, waxes and oils. These materials present different signals at different points that have made it possible to differentiate the intervention of different scribes in the studied panels.

During the year 2023, collaboration has been maintained with the PUCMM and UNPHU universities in the Dominican Republic, for the study of the mortars used in the first settlements of Colon. These are the first characterization works of the Columbus mortars in the Dominican Republic and will be the basis for the design of new mortars with biocidal properties, for which there is currently a collaboration project with the UNPHU University of the Dominican Republic.

The study of underwater heritage and the effect that nanoplastics have on its deterioration is a line that is being initiated in the group thanks to the collaboration with the Center for Humanities and Social Sciences of the CSIC. Work has begun studying the deterioration of some ceramic pieces found in 16th century shipwrecks using spectroscopic techniques (Raman and FTIR).



DRIFT Spectra registered from the black and red inks encountered in the writings found in the walls of the Nakhtmin burial chamber in Sheikh abd el-Qurna, Luxor (Egypt).

IEM-Proton Scanner prototype: M.J.G. Borge, O. Tengblad, V. García, A. Perea, PhD A.N. Nerio and JF González Linares

The IEM-CSIC group within the ASAP Project is in charge of Instrumentation for the detection of nuclear radiation and its associated electronics and the detection of charged particles. In addition, the group will be in charge of the simulation, design, construction and testing of gamma ray detectors and their associated electronics. In collaboration with the CMAM, experiments will be proposed to characterize the new pulsed ion source that was purchased in 2022 and will be received in May 2024. Meanwhile, the group's activities focus on the analysis and characterization of the prototype of proton-CT for proton therapy. The recent surge in proton therapy has revolutionized cancer treatment significantly decreasing the side effects and enhancing patients' overall well-being by precisely targeting tumors while sparing healthy tissues from unnecessary radiation exposure. The advancement in medical imaging techniques, particularly the shift from conventional X-rays to proton imaging, plays a key role in maximizing the efficacy of proton therapy. This transition holds the promise of refining the accuracy in determining relative stopping power (RSP) and lessening radiation exposure during diagnosis and treatment planning processes. The Nuclear Physics Group at the Institute of Structure of Matter (IEM, by its name in Spanish) has dedicated efforts to advancing this frontier. Throughout 2023, significant strides were made in analyzing the experiments conducted at the Bronowice Cyclotron Center (CCB) in Krakow, Poland, over the preceding two years. These experiments involved obtaining radiograph images of various samples containing spatial patterns fabricated from different materials; including ethanol, water, Delrin, Teflon, and aluminum; which were inserted within polymethyl methacrylate (PMMA) matrices under diverse conditions. One of the objectives of these experiments was to assess the impact of Coulomb multiple scattering on image generation (refer to the provided figure). Furthermore, this research endeavor investigated into critical aspects, including the determination of relative stopping powers (RSP) for different materials and the examination of Coulomb multiple scattering's influence on reconstructed images. These findings represent a significant leap toward the goal of clinical implementation, offering renewed hope for advancing cancer treatment efficacy and patient outcomes.

EURO-LABS (EU grant 101057511) M.J. G. Borge, coordinator of working package WP5:Open Diverse and inclusive Science

The core activity of the project is to support Transnational and Virtual Access to a network of Research Infrastructures in the fields of Nuclear Physics and of accelerator and detector technology for High Energy Physics. These research communities often work with different Research Infrastructures. Communication and dissemination of exchange opportunities are therefore strategic to increase the usage of the facilities by a larger number of researchers, with an emphasis of young researchers. The project's dissemination and inclusion activities include producing short video presentations of the research infrastructures involved in the project, webpage, newsletters, ... etc. We also address in this WP5, as task 2, the conceptual design for a prototype for the open nuclear physics catalog allowing Research Infrastructure and researchers to centralize the metadata of their datasets. This will foster improved scientific practices following the FAIR data principles towards effective Open Science in the community. It also provides them with an opportunity to automatically see their datasets to be findable for the rest of the scientific community and its future services. In addition, as task 3 we apply machine learning technique to facilitate the beam optimization of the

different facilities in a way that could be optimized by the user. We complete this WP5 with task 4 dedicated to hands-on training courses for young researchers and engineers.

[β-decay as a probe of the 2⁺ isospin doublet of ⁸Be: María José García Borge, Olof Tengblad, PhD Daniel Fernández Ruiz](#)

The presence of a 2⁺ doublet in ⁸Be, constituted by the 16.6 and 16.9 MeV excited states has been observed, since the mid-60s. An intriguing aspect of this doublet is its status as the best-known instance of a complete isospin mixing, where the 16.6 MeV (⁷Li+p) and 16.9 MeV (⁷Be+n) levels can be decomposed in an equal mixture of two pure isospin (T=0 and T=1) levels. While indications of this behaviour have been hinted through reaction experiments a direct confirmation is still pending. As explain in previous reports, we believe the beta decay of the 1-proton halo nucleus ⁸B into ⁸Be provides a valuable tool for exploring the doublet's isospin composition through the Fermi and Gamow-Teller components. Most of our work in this research line is focused on overcoming the main obstacle to resolve the feeding to the 2⁺ doublet through β⁺ decay: the low feeding to the isospin doublet, the dominant decay mode (88%) a broad 2⁺ state at 3 MeV. Experiment IS633, performed at the CERN/ISOLDE facility's IDS, is the latest attempt of our group to to investigate the 2+ doublet of ⁸Be through the β-decay of ⁸B. A mass-separated 50 keV 8BF2 beam, was implanted in a 30 mg/cm² carbon foil catcher. When ⁸B undergoes an EC/β⁺ decay, it feeds the excited states of ⁸Be. All excited states of ⁸Be are unbound and break up into either two α particles or a proton and a ⁷Li, depending on the level fed, a system of particle telescopes detects the breakup fragments. Our results are a two-order-of-magnitude improvement in statistics over the preceding benchmark experiment JYFL08 allowingfor the resolution of the continuum spectrum of ⁸Be from 1 MeV up to 17 MeV. Preliminary results of our analysis have been presented at the following conferences: European Nuclear Physics Conference (EuNPC 2022); PROCON2023 (June 25-30, 2023); XXXVII Mazurian Lakes Conference on Physics (September 3-9, 2023); and ISOLDE Workshop and Users meeting (November 29 - December 1, 2023).

[Studying the structure of ¹¹Li through transfer reactions: Olof Tengblad, Ágel Perea, María José García Borge, PhD Daniel Fernández Ruiz](#)

The term "halo nucleus" was coined to describe nuclei exhibiting an unusually large spatial extension, deviating from the standard $r=r_0A^{1/3}$. The initial empirical observation of this phenomenon arose from scattering experiments involving, among others, lithium isotopes. This discovery led to the interpretation of a new type of nuclear structure, characterized by a compact core and an external set of nucleons. Among the halo nuclei the ¹¹Li isotope, considered the quintessential two neutron halo.

While the ground state of ¹¹Li is well established, the same cannot be said about its excitation spectrum, despite multiple experimental attempts there is no consensus over the energy and number of excited states. Most of these experimental attempts are based on promoting a ¹¹Li nuclei from the ground state to its excited states through reactions. We are undertaking a new experiment to populate the excited states of ¹¹Li using the ⁹Li(t,p)¹¹Li reaction as the structure of ⁹Li is more simple. The experiment, scheduled for 2024 will take place at the Scattering Experiment Chamber (SEC) at CERN-ISOLDE in Switzerland. Our state-of-the-art setup is formed by a central tritium target surrounded by a system of five particle telescopes (PAD+DSSD) forming a pentagon surrounding the target up down and to its sides, to cover the forward and backward angels, the pentagons are complemented by a system of silicon discs and an S3 at the back, along with an S3-S5 telescope at the front, maximizes angular coverage. The tritium target will receive a ⁹Li beam with an energy ergy

of 72 MeV/nucleon populating the excited structure of ^{11}Li through the $^9\text{Li}(t,p)^{11}\text{Li}$ reaction, information of the excited states will be gathered from the emitted proton that will be detected by our set up. To process the data our DAQ employs compact digitizer cards (64 channels/per card) developed by Mesytec, these cards perform all the electronic readout while only requiring two cables (optical link and power) thus enabling us to make the setup extremely compact (only six cards are needed).

Our current work is focused in preparing this experiment, this in turn can be decomposed in three parts: simulations of the experimental setup (done in Geant4), preparation of the setup itself (including detectors and electronics), and development of the necessary software for data collection and subsequent analysis. The results of our simulations were presented on a poster at the European Nuclear Physics Conference (EuNPC 2022).

[Project MRR-HISTARS: O. Tengblad, M.J.G. Borge, A. Perea \(MICIN-MRR-NextgenerationEU CIE202301006\)](#)

The project HIE-ISOLDE Timing Array for Reaction Studies (HISTARS) a high-sensitivity detector for half-life measurements populated in nuclear reactions at HIE-ISOLDE: aims to construct a fast-timing array of detectors for use in medium energy reaction experiments. The project is divided into two phases. Phase 1 consists of a single fast-response hybrid particle detector at forward angles and two rings of gamma scintillators around the Miniball reaction chamber on the HIE- ISOLDE beam line. Phase 2 includes a second particle detector and a third ring of scintillators. The Spanish institutes participating involved in these developments are: Grupo de Física Nuclear, IPARCOS Fac. CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid (coordinator), IEM-CSIC, Madrid, IFIC, CSIC-UV, Valencia, Ciencias Integradas, UHU, Huelva, FAMN, Fac. CC Físicas, Universidad de Sevilla. The overall aim is to build a high sensitivity detector for half-life measurements of excited states populated in nuclear reaction studies at HIE-ISOLDE. The work is performed within 8 work packages (WP): WP1 is devoted to the identification of physics cases that will profit from the HISTARS setup, both for the improvement of count-rate capabilities for reactions studies employing Coulomb excitation and transfer reactions, as well as for the implementation of electronic lifetime measurements using fast-timing methods. The aim of WP2 is the selection of top-performing gamma scintillators for fast-timing, based on existing technologies, the definition of the external scintillator array (type, number and shape of detectors) and its optimal location. Monte Carlo simulations will be performed to assess the best position and optimal combination of Germanium and scintillator detectors to build a hybrid array. WP3 deals with the selection of optimal detectors with ultra-fast time response for half-life measurements of excited states populated in nuclear reaction studies at HIE-ISOLDE, with specific focus on particle detection and identification with sufficient time resolution. The new device needs to be combined or (partially) replace the existing silicon strip detector systems that used for the detection of the scattered beam and recoiling target nuclei, without losing the ID and position resolution abilities. Scintillator crystals and fibers coupled to different photosensors will be tested in the laboratory and the most suited technology will be chosen. WP4 addresses the design and construction of the mechanical structure to hold the gamma scintillators, and its implementation and integration with the existing Miniball support frame. WP5 deals with the purchasing of fast gamma scintillator crystals and photosensors, mounting and integration, and detector tests and fine tuning. Once tests have been performed, an offline setup of the external array will be mounted and tested with existing electronics. The array will be characterized and basic performance parameters regarding time and energy response and efficiency will be assessed. WP6 is devoted to the purchasing of the fast particle array detectors, and the mounting and tests of individual detectors. An offline test array will be mounted and verified with sources and standard

electronics. The inner array will be characterized and basic performance parameters regarding time and energy response and efficiency will be assessed. The aim of WP7 is the mounting and integration of the total device, its coupling to front-end electronics and data acquisition, and performance tests using sources and stable beams from HIE-ISOLDE. The final WP8 deals with commissioning with radioactive beam.

Project MRR-ISRS: T. Kurtukian-Nieto, O. Tengblad, L. Acosta, M.J.G. Borge, A. Perea (MICIN-MRR-NextgenerationEU CIE2301005)

The ISRS (ISOLDE Recoil Separator) is a novel high-resolution magnetic separator that will be installed at HIE-ISOLDE, CERN's high-energy radioactive beam facility. The design of the ISRS spectrometer, unlike state-of-the-art linear spectrometers that use dispersive planes, takes advantage of the flight time of the fragments produced at the target of the reaction to perform mass separation. By injecting the fragments produced in the reaction into a particle storage system composed of a series of iron-free superconducting multifunction magnets, cooled by cryo-coolers and integrated into a mini-storage ring, it is possible to achieve resolutions of 1/2000. The currently designed system is compact, has a diameter of 3.5 m and a relatively low magnetic field ($< 3\text{T}$) and is capable of recirculating with 100% efficiency a cocktail beam of heavy mass isotopes (up to $A=234$) at 10 MeV/u with a dispersion at the moment of 30% and completely separated unit masses when operating in isochronous mode. A prototype 90° magnet consisting of a CCT solenoid (FUSILLO) with a pure central dipole field of 3.0 T has been developed and is currently being tested at CERN. A second family of magnets, using straight, short and compact, iron-free CCT magnets, is currently being developed within the SRSI-Spain MRR grant (€3 million, €700 k€ allocated to the IEM). The novelty of the development lies in the implementation of dipole and quadrupole functions in a compact and short CCT magnet, which includes an easy-to-operate cryostat that can allow the circulation of the ion beam. The first prototype, called MAGDEM (Magnet Demonstrator), will be integrated into a dedicated beam focusing and transport system and assembled into a test bench suitable for carrying out experiments with real beams. At the IEM we developed the test bench focusing system (hot quadrupoles and beam monitoring systems), the reaction chamber with different types of targets (solid and jet type) and the focal plane detectors. The system will be installed at the CMAM, where tests can be carried out either with protons or heavy ions in a continuous beam or with a pulsed beam in the energy range between 1 and 10 MeV.

First GAMMA-RAY Spectroscopy of ^{135}Sn : Andrea Jungclaus, PhD student Jaime Acosta

The decay of excited states of the nucleus ^{135}Sn , with three neutrons outside the doubly-magic ^{132}Sn core, was studied in an experiment performed at the Radioactive Isotope Beam Factory at RIKEN. Several γ rays emitted from excited ^{135}Sn ions were observed following one-neutron and one-neutron-one-proton removal from ^{136}Sn and ^{137}Sb beams, respectively, on a beryllium target at relativistic energies. Based on the analogy to ^{133}Sn populated via one-neutron removal from ^{134}Sn , an excitation energy of 695(15) keV is assigned to the $3/2^-$ state with strongest single-particle character in ^{135}Sn . This result, which recently has been submitted for publication in Physics Letters B (A. Jungclaus et al., "Position of the single-particle $3/2^-$ state in ^{135}Sn and the $N=90$ subshell closure") provides the first direct information about the evolution of the neutron shell structure beyond $N=82$ and thus allows for a crucial test of shell-model calculations in this region. The experimental findings are in full agreement with calculations performed employing microscopic effective two-body interactions derived from CD-Bonn and N³LO nucleon-nucleon potentials, which do not predict a pronounced subshell gap at neutron number $N=90$. The occurrence of such a gap in ^{140}Sn , i.e., when the $1f_{7/2}$ orbital is completely filled, had been proposed in the past, in

analogy to the magicity of ^{48}Ca , featuring a completely filled $0f_{7/2}$ orbital one harmonic oscillator shell below.

Effective Charges in Heavy Nuclei: Andrea Jungclaus, PhD student Jaime Acosta

The known $I_p = 8_1^+$, $E_x = 2129\text{-keV}$ isomer in the semi-magic nucleus ^{130}Cd was populated in the projectile fission of a ^{238}U beam at the Radioactive Isotope Beam Factory at RIKEN. The high counting statistics of the accumulated data allowed to determine the excitation energy, $E_x = 2001.2(2)\text{ keV}$, and half-life, $T_{1/2} = 57(3)\text{ ns}$, of the $I_p = 6_1^+$ state based on gg coincidence information. Furthermore, the half-life of the 8_1^+ state, $T_{1/2} = 224(4)\text{ ns}$, was remeasured with high precision. The new experimental information, combined with available data for ^{134}Sn and large-scale shell model calculations, allowed to extract proton and neutron effective charges for ^{132}Sn , a doubly-magic nucleus far-off stability. A comparison to analogous information for ^{100}Sn provides first reliable information regarding the isospin dependence of the isoscalar and isovector effective charges in heavy nuclei. This work has recently been submitted for publication in Physical Review Letters (A. Jungclaus et al., “Excited-state half-lives in ^{130}Cd and the isospin dependence of effective charges”).

High-resolution gamma ray spectroscopy of ^{136}Te within the HiCARI project @RIBF-RIKEN: PhD Jaime Acosta, Dr. Andrea Jungclaus

During the year 2023, great progress has been made regarding the analysis of experiment RIBF193, already introduced in the past “Memorias” of years 2021 and 2022. The experiment consisted on the in-flight gamma-ray spectroscopy of several radioactive nuclear beams at relativistic energies, considering ^{136}Te as the main goal of the research. With the Doppler reconstruction of the energy spectra and the corresponding fits using Geant4 simulations, it is possible to measure the energies and half-lives of the excited states after the reaction of the radioactive beam with the secondary target, along with the reaction cross-sections. The inelastic and $1n$ reaction channels with Au and Be targets respectively of ^{136}Te were analyzed, and the energies and half-lives of the 2^+ , 4^+ , 6^+ and 8^+ collective excited states were obtained. These lifetimes are in good agreement with the previous values from literature, but feature significantly reduced uncertainties. The lifetime of the 8^+ state was measured for the first time. The next goal is now to determine exclusive reaction cross-sections, which will allow for a more complete study of this nucleus. Incidentally, part of the data from experiment NP1912-RIBF189, which was performed within the same experimental campaign with the goal to study $N=82$ nuclei below ^{132}Sn , was also analyzed in order to check the consistency of the method. In particular, the energies and half-lives of the excited states of ^{131}Sn and ^{132}Sn were obtained, which thanks to the high statistics will provide some insight about what should be expected for our case of interest, which is ^{136}Te .

Study of single-particles states in fp-shell nuclei through $^{50}\text{Ca}(d, p)^{51}\text{Ca}$ transfer reaction @RIBF-RIKEN: PhD Carlos Ferrera González, Andrea Jungclaus

We have continued with the analysis of the SHARAQ12 experiment, carried out at the RIKEN-RIBF facilities (Wako, Japan) in December 2022 (see Memoria 2022). This experiment aims to study the single-particle structure of ^{51}Ca through the transfer reaction $^{50}\text{Ca}(d, p)^{51}\text{Ca}$, for this purpose a secondary beam of ^{50}Ca degraded in energy to approximately 15.2 MeV/nucleon has been collided with a secondary target of CD_2 ($\rho = 260\text{ }\mu\text{/cm}^2$). The calibration of the “Strip Readout Parallel Plate Avalanche Counters” (SR-PPACs) tracking detectors placed along the beamline has allowed for characterization of the

position, speed and composition of the secondary beam at different stages. Firstly, the particle identification of the incident beam was carried out, determining a purity of ^{50}Ca in the BigRIPS separator of around 70%. Subsequently, the position, angle and energy with which the ^{50}Ca reaches the secondary target placed on the OEDO line has been established; this is essential to reconstruct the reaction (d,p). Finally, the mass-charge ratio of the particles passing through the target has been calculated, which has allowed for ^{51}Ca identification in the SHARAQ spectrometer. In parallel, the calibration and energy analysis of the TINA2 segmented silicon detector has been carried out, obtaining an excitation spectrum and its corresponding angular distribution, it has therefore been possible to identify the first protons coming from the neutron transfer reaction of interest. Currently the objective is to identify as many $^{50}\text{Ca}(d, p)^{51}\text{Ca}$ reactions as possible, using in combination the SHARAQ spectrometer and the TINA2 detector

[Cu decay into neutron-rich Zn isotopes: shell structure approaching \$^{78}\text{Ni}\$: D. Palacios Suárez-Bustamante \(master student\), B. Olaizola \(RYC2021-031494-I\)](#)

This experiment aims to study neutron-rich Zn isotopes near ^{78}Ni to explore the evolution of proton and neutron shell gaps. Neutron-rich Zn isotopes, particularly $A=74$ to $A=79$, are pivotal for understanding nuclear structure as they bridge gaps in our knowledge of the nuclear shell model, especially near the neutron-drip line. Recent discoveries challenge established concepts of magic numbers, suggesting the potential for new physics in isotopes far from stability, including phenomena like shape coexistence. The research focuses on the β decay of Cu isotopes to Zn, aiming to refine the level scheme and measure lifetimes of transitions, thereby shedding light on collectivity and shell evolution near $N=50$. The experimental setup includes the ISOLDE Decay Station with advanced detection equipment for precise measurements. Key motivations are the structural insights into odd-even Zn isotopes and the resolution of discrepancies in experimental data for even-even Zn isotopes. This research could significantly impact our understanding of nuclear structure and astrophysics, particularly regarding the r-process in nucleosynthesis. This experiment has already generated a wealth of data that is being analyzed by a number of students. Particularly, D. Palacios Suárez-Bustamante analyzed the decay of ^{77}Cu into $^{76,77}\text{Zn}$ as part of his master thesis at IEM-CSIC. He successfully defended it obtaining the highest grade.

[Exploring shape coexistence across \$N=60\$ in \$^{100}\text{Sr}\$ using IDS: J. Sánchez Prieto, B. Olaizola \(PIE-20235AT018\)](#)

This experiment aims to investigate the nuclear structure of ^{100}Sr by identifying excited 0^+ states to shed light on the observed sudden change in nuclear deformation within this region. The study plans to populate Sr isotope excited states via β and β -n decay of ^{100}Rb at the ISOLDE Decay Station, using the SPectrometer for Electron DEtection (SPEDE) for identifying 0^+ states through γ - γ angular correlations and $E0$ transition observations. The experiment's significance is anchored in the phenomenon of shape coexistence, evident in the drastic shape transition across Sr and Zr isotopes near neutron number $N \approx 60$. This transition is characterized by notable changes in charge radii, a drop in the 2^+ state's excitation energy, and increased $B(E2: 2^+ \rightarrow 0^+)$ values, indicating a move from spherical to deformed nuclear shapes. Theoretical predictions suggest a deformed and spherical shape coexistence, with a possible low-lying excited 0^+ state in ^{100}Sr indicating a spherical configuration. Previous research has hinted at such states but lacks conclusive evidence,

especially for isotopes beyond $N=60$. The experiment is planned to run during the 2024 campaign at ISOLDE. However, during 2022, there was the opportunity to run a partial beamtime of this experiment, focused on measuring half-lives of excited state using the fast timing method with $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ crystals. J. Sánchez Prieto is currently analyzing the data, as a part of his PhD. Very preliminary results suggest the presence of multiple long-lived states which meanlives could be extracted.

[The lifetime of \$^{54}\text{Ti}\$ and the proposed \$N=32\$ shell gap: B. Errandonea Félix \(master student\), B. Olaizola \(RYC2021-031494-I\)](#)

There is mounting evidence that far from the Valley of Stability the relative energies between nuclear shells changes, giving rise to new Magic Numbers and the disappearance of old ones. One such case is ^{52}Ca ($Z=20$, $N=32$), for which a high first $E(2^+)$ was measured, suggesting the presence of a new shell gap. However, ^{54}Ti ($Z=22$, $N=32$), only two protons above, presents a half-life far too short for a semi-magic nucleus. Experiment S5422, carried at TRIUMF, Canada, using the state-of-the-art GRIFFIN, aimed at re-measuring the half-life of ^{54}Ti with increased precision and to greatly expand the level scheme of ^{54}V . B. Errandonea Félix analyzed part of the data of this experiment and found that the lifetime is, indeed, several times longer than previously reported. She also found a wealth of new information on the structure of ^{54}V . This was part of her master thesis at IEM-CSIC, which she successfully defended obtaining the highest grade.

[Structure of neutron-rich Fe nuclei below \$N=40\$ \$^{68}\text{Ni}\$: K.I. Hassan \(master student\), R. Umashankar \(PhD student, TRIUMF-UBC, Canada\), B. Olaizola \(RYC2021-031494-I\)](#)

While initially it was suggested that $N=40$ could be a new magic number for ^{68}Ni far from stability, it was quickly observed that for Fe and Cr isotopes (two and four protons below) it was the opposite scenario. This was explained via shell model calculations using the LNPS interaction as an island of inversion around ^{64}Cr . In this region, the energy between the $g_{9/2}$ orbital and the pf shell is reduced so much that it favors the promotion of neutrons to the $g_{9/2}$ orbital, inducing a strong deformation in the ground state. This experiment, carried using GRIFFIN at TRIUMF, Canada, aimed at studying the beta decay of neutron-rich Mn isotopes into Fe. The analysis is being carried by a number of students and postdocs. Specifically, R. Umashankar, from the TRIUMF-UBC, Canada, is analyzing the decay of ^{68}Mn and is building the first comprehensive level scheme of ^{68}Fe . This is part of her PhD thesis, which she is expected to defend in 2025. R. Umashankar visited the IEM-CSIC in order to work with B. Olaizola and advance in her analysis. K.I. Hassan analyzed the decay ^{62}Mn into ^{62}Fe . He greatly expanded the known level scheme and located some tentative 0^+ states. This analysis formed his master thesis, as part of the prestigious Erasmus Mundus Master in Nuclear Physics. He was awarded the maximum available grade at the University of Padua, Italy.

[WASA@FRS: DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei \(CAM-Talento ref: 2019-T1/TIC-13194 & 2023-5A/TIC-28925\): C. Rappold, PhD S. Escrig López](#)

Within the WASA@FRS collaboration, experimental campaign took place successfully in the first trimester of 2022, with the completion of the S447 experiment of hypernuclear spectroscopy and the S490 experiment of eta- prime nuclei at the GSI-FAIR facility, Germany. Our Spain-Japanese collaboration between CSIC – Spain and RIKEN – Japan is at the forefront of addressing the hypertriton puzzle through the application of deep learning techniques with WASA-FRS experiment and with a second experiment. We lead as well the search and identification of hypernuclei using deep learning techniques in nuclear emulsions

irradiated by kaon beams in the J-PARC E07 experiment. Our focus is currently on measuring the hypertriton binding energy with the world's highest precision.

The nuclear emulsion, a specialized photographic film recording charged particle trajectories, is employed in this experiment for its submicron spatial resolution. An all-area search method has been developed to comprehensively explore the entire volume of the nuclear emulsion plate and detect events of interest. To analyze a large amount of image data efficiently, we introduced an object detection technique using the deep learning model Mask R-CNN to detect the decayed hypertritons. Overcoming the challenge of obtaining sufficient training data, a generative adversarial network model (GAN) was created using Geant4 simulation data and real background images of nuclear emulsions. This facilitated the training of Mask R-CNN, allowing us to find hypertriton decay in the emulsion plate for the first time via AI. The ongoing analysis of a large dataset has already led to the unique identification of events associated with hypertriton decay, with the determination of the binding energy currently in progress. New AI development is now directed on unsupervised learning in order to analyze all the emulsion plate by segmenting and so discriminate the charged particle tracks in the full volume of the emulsion stacks. First results can be seen in the following panels, in which the extracted emulsion image (left panel, a), is then analyzed by AI model that segment the, and second AI tracking model allows us to cluster and discriminate each track with metadata useful for performing a general search of decay vertices

[Hyp@FRS - Machine learning methods applied to the spectroscopy of Hypernuclei: the puzzle of the hypertriton lifetime and of the nnLambda existence studied at WASA@FRS: C. Rappold, S. Escrig López](#)

The goal of Hyp@FRS is to study precisely light hypernuclei with ion-induced reactions by employing the fragment separator of GSI and FAIR facilities in Darmstadt, Germany, as a high-resolution forward spectrometer. The objectives of Hyp@FRS is the improvement of spectroscopy through machine learning. With the successful run of S447 experiment, the proposed project aims to validate or discard the discoveries that we published from our first experimental campaign HypHI – Phase 0. The development of innovative methods in machine learning on the hypernuclear spectroscopy experiments is be carried out. Convolutional neural networks and long short-term memory architectures will be investigated first for the non-linear modeling of ion optics in the magnetic spectrometer, and secondly in the tracking of measured particles in the experimental apparatus. The WASA@FRS experiment campaign took place over the first trimester of 2022. The data analysis uses the machine learning methods explained above. Additionally, the R&D for the electronic readout of the silicon micro vertex detectors and its construction is carried out by this project. The final goal of the project is to tackle the current hypertriton lifetime puzzle and the confirmation of the observation of the nn Λ bound state (a state of two neutrons and a Λ hyperon).

[NewHyp - New developments based on machine learning techniques in the search for hypernuclear signals in the \${}^6\text{Li}\$ - \${}^{12}\text{C}\$ and \${}^{12}\text{C}\$ - \${}^{12}\text{C}\$ collisions of the WASA-FRS HypHI experiment \(AEI ref: CNS2022-135768\): C. Rappold](#)

Multi-messenger observations in astrophysics have become a key element in constraining the nuclear equation of state and the characteristics of neutron stars. The stellar characteristics of a neutron star are largely affected by baryonic interactions. Constraints from experimental heavy ion observations show remarkable consistency with astrophysical measurements and provide complementary information at intermediate densities. In that

respect, the production of exotic hypernuclei in ion-induced reactions is expected to add precise observables at higher densities than those obtained in previous experiments. Data analysis of ${}^6\text{Li}-{}^{12}\text{C}$ and ${}^{12}\text{C}-{}^{12}\text{C}$ collisions at 2 GeV per nucleon from the WASA@FRS HypHI experiment will be the central objective of the NewHyp project. Within NewHyp, we develop new machine learning techniques to strengthen the hypernuclear signals. The development of innovative methods in machine learning will be carried out on hypernuclear spectroscopy experiments to better separate the background contribution from the hypernuclear signal in the invariant mass reconstruction. The project aims to improve the determination of the interaction point of collisions, increase the background/signal ratio of the hypernuclear observation. This will allow us to have the clearest observation of different hypernuclei of interest: $3\Lambda\text{H}$, $4\Lambda\text{H}$, $\text{nn}\Lambda$, and $9\Lambda\text{B}$, first proton-rich hypernuclei. NewHyp will demonstrate a new experimental approach paving the way for the observation of proton-rich hypernuclei with nuclear collisions for the first time. The necessary improvement for the future WASA-FRS experiment will be derived from the analysis of the data and the proposed development in electronics. Finally, the NewHyp project aims to create an on-chip machine learning inference processing unit to compress the data stream and augment the WASA-FRS data acquisition system.

MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

- Astrophysical ices.
- Spectroscopic characterization of cold plasmas of astrophysical relevance.
- Generation, processing and study of interstellar dust analogs.
- Raman Spectroscopy in supersonic gas jets.
- Energy transfer by inelastic molecular collisions.
- Spectroscopic parameters of molecules of relevance in collisional, atmospheric and combustion processes.
- Atomistic modeling and experimental studies of clays, C3S and C2S cements mineral phases, ices of astrophysical interest and adsorption study of air pollutants in porous materials zeolite type or active carbon.
- Quantum Control of Alignment and Orientation in Isolated Molecules and Ultracold Dipolar Gases.

EMPLOYED TECHNIQUES:

- IR spectroscopy and mass spectrometry applied to low temperature, low pressure systems.
- Computational methods: Gaussian, SIESTA, CASTEP, CRYSTAL, CP2K, Suite Materials Studio.
- Plasma generation of cold complex plasmas in low pressure RF gas discharges.
- Mass spectrometry of neutrals and ions. Langmuir probes.
- Visible and near UV emission spectroscopy. Polarimetry.
- Linear and non-Linear (Stimulated) Raman Spectroscopy.
- Supersonic gas jets.
- Raman-Raman double resonance spectroscopy.
- Difference frequency laser spectroscopy.

RESEARCH ACTIVITY:

MOLECULAR FLUID DYNAMICS

During 2023 we have continued studying CO₂ out of equilibrium at high temperatures, trying to apply Raman spectroscopy to gaseous microfluidics, and working in the spectroscopic characterization of atmospheric pollutants, within the framework of the ongoing projects. All of these studies are based on experiments in sub- and supersonic gas jets, probed by means of quantitative Raman spectroscopy. Subsonic gas jets make it possible to measure spectral properties of the molecules in conditions that are incompatible, or difficult to

achieve, in cells. On the other hand, supersonic gas jets are an extraordinarily fertile medium in fluid dynamics, where the study of the inelastic intermolecular collisions, which are the fundamental mechanism of energy transfer in gases, is feasible. The laboratory of Molecular Fluid Dynamics is equipped with two complete instruments for gas- and liquid-jet diagnostics by Raman spectroscopy; these instruments have been developed over the last twenty-five years, and their performance and flexibility are unique worldwide.

We have continued studying the rotational and vibrational relaxation of CO₂. The relaxation of CO₂ plays a key role in the radiative balance within Earth's atmosphere, as well as those of Venus and Mars, in the entry of spacecraft into these planets, or in the synthesis of fuels by low-temperature CO₂ plasmas. Despite these, experimental data on the involved elementary processes are scarce. We have carried out new experiments with supersonic jets of pure CO₂ and diluted to 10% in He, to complete the corpus of experimental data on inelastic collisions of CO₂. On the other hand, to determine with more accuracy the intrinsic intensities (polarizability transition moments) of the Raman vibrational bands, we have carried out new quantitative measurements of the Raman spectrum of extremely hot CO₂, up to 1500 C, in two different systems: a slow flow from a red-hot tube by magnetic induction, and a CH₄+O₂ flame enriched with CO₂. The absolute intensities thus obtained allow us to quantify the total density of molecules and the populations of the rotational and vibrational energy levels of gas jets. From these measured quantities, the corresponding rotational and vibrational temperature can be retrieved, illustrating the breakdown of equilibrium between these internal motions. From its time evolution along the jet, we have been able to determine the rate coefficients between internal levels due to inelastic collisions, and from these, other magnitudes of the flow such as relaxation times or bulk viscosity. A first paper on the rotational relaxation rates in the thermal range of 60 to 260 K has been submitted for publication.

Within the framework of the European project ATMOS, we have continued working on the Raman spectra of acetone, CH₃COCH₃, and diacetyl, CH₃COCOCH₃. These molecules are involved in the degradation cycles in the atmosphere of several volatile organic compounds (VOCs). We have recorded the complete Raman spectrum of diacetyl (gas) in supersonic jet, both pure and diluted in He or Ar. A first analysis of this spectrum, including the calculation of frequencies and intensities from first principles, has constituted the Grade Thesis of the student Marcos de Lucas, from the Universidad Complutense. On the other hand, we have recorded the Raman spectrum of acetone (gas) at different temperatures in a hot cell up to 100 C. The profile of the band at 780 cm⁻¹ turned out to change significantly with temperature, due to the competition of many hot bands, allowing that band to be used as a thermal probe. The spectral analysis carried out by Dr. Samira Dalbouha, from the Université Mohamed V of Rabat, made it possible to tentatively locate a previously unknown Fermi resonance. It is expected that the analysis of these spectra will allow a better characterization of the intramolecular dynamics, and the remote detection of those species. This work is carried out in collaboration with the department of Theoretical Chemistry and Physics of the IEM (M. L. Senent).

Finally, in the research line devoted to microfluidics, two new cells, with 1x5 mm² internal channels, have been built and tested. Mixtures of N₂ and acetone (gas) were injected into these channels, and thermal gradients were forced between two of their faces. Using the Raman spectra of these species, we have been able to measure the temperature of the gas inside such small channels, observing thermal gradients of more than 15 K along the transverse dimensions. The gradient along the short dimension (1 mm) was measured using

a novel 45° geometry, where the same window is used for excitation and collection. Part of this work is included in the PhD Thesis of Slaven Bajic, within the framework of a collaboration with the group of Prof. S. Colin of the Université Paul Sabatier of Toulouse (France).

MOLECULAR PHYSICS OF ASTROPHYSICAL SYSTEMS AND PLASMAS

Astrophysical ices

Motivated by the recent detection of indene in the gas phase in cold regions of the ISM and with the aim of guiding its detection in the solid phase in those environments, low temperature infrared (IR) spectra of solid indene have been provided. Indene is the first individual member of the family of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) unequivocally detected in space. In our experiments, Indene and indene/water ices were generated by vapor deposition under high vacuum conditions on a cold surface at temperatures between 10 K and 160 K. IR spectra and band strengths were provided between 4000 and 500 cm^{-1} (2.5 – 20 μm). Two solid phases of indene have been identified, amorphous and polycrystalline. For ices generated at 10 K and heated at 1 K/min the phase transition from amorphous to crystalline takes place between 120 K and 130 K. The solid sublimates at 180 K under high vacuum conditions. In addition, ice mixtures of indene diluted at 2% and 7% in amorphous water at 10 K have been studied. Their infrared spectra show that the indene molecule is not greatly altered by the water ice environment. From a theoretical point of view, we have built crystalline and amorphous indene solids and calculate its infrared spectra using density functional theory. In the absence of previous information in the literature, a monoclinic symmetry was suggested for the crystal, based on the comparison of the calculated and experimental IR spectra.

On the other hand, with the aim of helping to understand the formation pathways of this aromatic molecule, we have investigated the stability of indene ices and indene/water mixtures under VUV irradiation (120 -180 nm) and high-energy electron bombardment (5 keV), under conditions relevant to the interstellar medium. IR spectroscopy was used to follow the effects of irradiation in the high vacuum chamber. The experiments provided information on destruction cross sections as well as about the dissociation chemistry of this species. Toluene and styrene were identified in the IR spectrum of the irradiated ice. The formation of more complex species, such as ketones and alcohols, is also evident in the IR spectra and was complementarily detected in thermal programmed desorption experiments. Regarding the destruction cross sections of pure indene ice, it was observed that the efficiency of both photolysis or radiolysis does not depend on the temperature of the ice, between 10 K and 130 K. In the irradiation experiments of indene/water ice mixtures, it was observed that water ice does not protect indene from the effects of VUV photons or Cosmic Rays (simulated by 5 keV electrons) but, on the contrary, participates in the chemistry that enhances its destruction.

The experiments on indene began in 2022, but it was during 2023 that they were completed, analyzed and published in Monthly Notices of the Royal Astronomical Society and Astronomy&Astrophysics (January 2024).

In November we stayed for a week at the Atomki facility in Debrecen (Hungary), where we studied the chemistry induced by Cosmic Rays in ices containing hydroxylamine. Pure NH_2OH ices and mixtures with H_2O , CO and D_2O were studied at 20 K, irradiated with 15 keV H^+ ions. The goal of the study is to find complex organic molecules in processed ices,

and to learn how different ice compositions affect the chemistry and destruction efficiency of NH_2OH by Cosmic Rays. Although the chemical pathways leading to the formation of NH_2OH in astrophysical ices have been thoroughly studied, to our knowledge, the next step in the chemical evolution that would begin with NH_2OH as a precursor in ice has not been addressed experimentally. The data obtained are being analyzed and will be shortly published.

During 2023 and in the preceding years, we have actively participated in the Ice-Age “Tracing the building blocks of life with the James Webb Space Telescope”, Early Release Program working group, particularly in the “laboratory astrophysics” section. Our contribution is not only to provide new experimental data but also to adequately use those available in the literature, taking advantage of our knowledge of their specific characteristics. We have been able to extract information about the size of the ice/dust grains in the dense cloud Chameleon I. To achieve that, the spectral profile of the JSWT observations were simulated considering dispersion plus absorption effects, using the appropriate optical constants of ice and dust analogs. It has been confirmed that grains reach micrometer sizes, which implies innumerable changes in the interpretation of local microphysics. The work has been accepted in Nature Astronomy and published in January 2024.

[Infrared spectroscopy of molecular ions of astrophysical relevance.](#)

We have completed the implementation of a recirculating cryocooler for the hollow cathode. This system dissipates the thermal energy of the plasma (~ 100 W) and cools the species (-75 C), intensifying and simplifying the spectrum. We have started to do preliminary test for implementing a radio-frequency discharge, occasionally replacing the hollow cathode. With a properly impedance-matched coil we can excite a plasma without electrodes, which can be useful under certain circumstances. We have published the results obtained in the previous year in collaboration with Drs. O. Asvany, S. Schlemmer, D. Gupta and W. Silva, on vibration-rotation and pure-rotation spectra of several isomers and isotopologues of C_3H_3^+ . Very recently we have extended these studies to bands corresponding to other symmetry modes. We want to highlight that our experimental results have led to the identification of a new molecule in the interstellar medium, the H_2CCCH^+ (propargyl) cation, in collaboration with members of the Molecular Astrophysics Group (IFF-CSIC). The *c*- C_3H_3^+ (cyclopropenyl) cation is more favourable energetically, and should be more abundant, but its lack of permanent electric dipole moment precludes its detection in the radioastronomy bands. We have also obtained high-quality vibration-rotation and pure-rotation data on the deuterated variant *c* $\text{C}_3\text{H}_2\text{D}^+$, but its low dipole moment and the lower D abundance have not allowed its detection in space.

[Generation, Characterization and processing of interstellar dust analogs.](#)

Cosmic dust analogs have been generated in the capacitively coupled plasma chamber. Concentrations of both neutral and charged molecules have been measured under conditions prior to the nucleation of nanoparticles in $\text{Ar}/\text{C}_2\text{H}_2$ plasmas with different N_2 content. A great collection of ions with masses exceeding 200 u has been found. Particular attention has been paid to anions, scarcely studied in previous bibliographic data, whose behavior show very different trends with N_2 concentration among them. It is worth noting that in plasmas with a low N_2 content, the distributions of the $\text{C}_n=\text{evenH}^-$ and $\text{C}_n=\text{oddN}^-$ ($n < 10$) anions, have similitudes with those found in interstellar space. These are the only anion families found to

date in the interstellar medium. Theoretical and experimental efforts are in progress to explain the processes occurring in these plasmas. Part of this study has been presented as an invited talk in International Conference on Research and Applications of Plasmas, PLASMA 2023 in Varsovia, Polonia.

A laser scattering-based system has been developed to obtain the spatiotemporal distribution of nanoparticle sizes within the plasma chamber. Additionally, the temporal evolution of neutral species, dust density, electron density, and temperature has been measured. This study has been presented as invited talk in CPPA 2023, XXth International Conference on Plasma Physics and Applications, in Iasi, Rumanía. In collaboration with IAA-CSIC, the optical response of these nanoparticles has been also characterized. Thus, we have characterized both the growth process and the properties of nanostructured dust. This work has been published in *Astrophysical Journal Supplement Series*.

Thin films have been generated in inductively coupled He/CH₄ plasmas. They were irradiated at the 3MV Tandetron facility in Romania in collaboration with I. Topala (U. Iasi). Thus, we have analyzed the effects of cosmic rays on analogs with different morphologies.

[Dynamics of elementary chemical reactions.](#)

In collaboration with the Department of Physical Chemistry of the Universidad Complutense (Unidad Asociada CSIC) we have continued theoretical studies on the reactivity of the F+HD system at very low (< 1 meV) collision energies. We are specifically studying the coupling of rotational and orbital angular momenta in the entrance and exit channels, effects of parity conservation, and possible anisotropies in the two isotopic output channels.

[Atomistic modeling and experimental studies of clays, C3S and C2S cements mineral phases, ices of astrophysical interest and adsorption study of air pollutants in porous materials zeolite type or active carbon.](#)

Computational modeling simulations and quantum calculations have been conducted through theoretical calculations on both workstations and supercomputing HPC infrastructures. These simulations aimed to theoretically characterize the structural and IR spectra of indene. Additionally, within the field of Astrophysics, a series of simulations of the phosphine molecule in environments resembling the clouds of Venus or comet ices have been performed and preliminary results was shown in 7^o reunión CPESS ("Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar") and the corresponding publication is currently in progress.

Similarly, in the realm of mineral phases, the calculation and analysis of structures, as well as the resolved IR and Raman spectra of the principal mineral phases of Portland cement, namely C2S and C3S, have been carried out. The excellent results of this research were published in *Cement and Concrete Research*.

Furthermore, the characteristics of absorption of atmospheric pollutants, particularly in the field of nitroderivatives such as nitrophenol and nitroanthracene, and their interaction with activated carbon have been investigated. The outcomes of these studies, including results published in *RCS Advances*, contribute valuable insights to a relatively underexplored area in this field.

LASER SPECTROSCOPY

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

The activities carried out in the Laser Spectroscopy Laboratory throughout 2023 are a continuation of the research line of previous years, started in 2020 and centered around the experimental study, by means of stimulated Raman spectroscopy (SRS), of spectral line broadenings in binary collisional systems in which one of the two colliding species, either the spectrally active one or the perturber, is the molecule of carbon monoxide, CO. After the intense experimental activity of 2022, which allowed the obtention of experimental data on different collisional systems, the work in 2023 has been devoted to the processing and analysis of the data collected in those experiments and especially the comparison of these data with those obtained by computational means in foreign research groups with which we keep stable collaborations, followed by the publication of the corresponding comparative studies. The work in 2023 has been centered around two collisional systems:

- CO-H₂ in the S branch ($\Delta J=2$) of its pure rotational Raman spectrum.
- CO-H₂ in the Q branch ($\Delta J=0$) of the rovibrational Raman spectrum of its fundamental vibration.

In this naming convention the first molecule of the pair is the “active” species, whose spectrum is recorded in order to study the changes in the shapes and widths of its spectral lines induced by collisions, while the second molecule acts as the perturber.

The obtention of pure rotational Raman Spectra through the SRS technique in the CO-H₂ system constituted an experimental milestone for the laboratory in 2022, given the difficulty in accessing wavenumbers as low as the ~ 11 cm⁻¹ of the S(0) rotational line of CO with an experimental technique based on the frequency difference of two laser sources. The analysis of the registered spectra allowed the obtention, at three different temperatures (77, 180 and 295 K), of sets of collision broadening coefficients for the spectral lines from S (0) to S (20), as well as their corresponding exponents that model their dependence with the temperature. Throughout the year 2023 Professor Franck Thibault, from the University of Rennes 1, has carried out computational simulations in this collisional system using very accurate Close Coupling (CC) methods and modern, recently published potential energy surfaces. As a result accurate sets of collisional broadening coefficients for the first lines of the pure rotational Raman spectrum in the CO-H₂ system have been obtained. A detailed comparison has been carried out between our experimental results and those calculated by Professor Thibault, which shows excellent coincidence for all the lines compared at the three reference temperatures with the exception of S (1).

In the case of the CO-H₂ system in rotation-vibration, and from the effective collisional cross-sections obtained in the course of the previous calculation, Professor Thibault has derived, using a series of approaches, sets of collisional broadening coefficients for the lines in the Q-branch rovibrational spectrum at the three temperatures at which the measurements were carried out in our laboratory, as well as line mixing coefficients and temperature exponents. While these sets of coefficients were not expected to be as accurate as those obtained for the pure rotational spectrum, their coincidence with our experimental values for this system has been very satisfactory again, especially at the temperatures of 298 and 195 K, while at 77 K an obs-calc deviation of the order of 8% in the worst case for the broadening

coefficients of the first lines of the rovibrational spectrum was observed. This deviation is attributed to the approximations used in the calculations.

All details related to the experiments and the corresponding calculations for these two systems have been collected, together with their results and the corresponding comparative analyses, in a manuscript sent to the Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer that was accepted for its publication on December 15, 2023.

Additionally, and throughout 2023, two articles belonging to the same line of research of collisional broadenings in CO systems that had been submitted for publication in 2022 have been published: the first one, also published in the Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, corresponds to an experiment/theory comparative study similar to those described above that was carried out for the N₂-CO system, while the second, of a purely experimental nature, describes the spectroscopic apparatus developed for the pure rotational measurements in the CO-H₂ system and the measurements themselves, and has been published in the Journal of Raman Spectroscopy.

All the mentioned works, together with others already published in previous years and that belong to the same line of research, have been part of the doctoral thesis of Denís Paredes Roibás, whose dissertation has been written throughout the year 2023 and has already been deposited before the Rectorate of Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED). The thesis, titled "MEASUREMENT OF SPECTRAL LINE PROFILES BY HIGH RESOLUTION RAMAN SPECTROSCOPY: COLLISIONAL BROADENINGS IN CO MIXTURES", will be defended in that university on February 2, 2024.

In addition to the work described above, the pause in the collection of experimental data throughout 2023 has been used to perform maintenance work in the laboratory, especially the definitive substitution of the obsolete Ar⁺ laser sources with solid state lasers, much more compact and efficient and easier to operate.

MACROMOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

RESEARCH LINES:

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

RESEARCH SUBLINES:

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

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 (DSC).
- Incoherent quasielastic neutron scattering (IQNS).
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy (SEM).

- Raman Spectroscopy.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion, capillary extrusion and elongational rheometry.
- Microrheology.
- Dynamic mechanical analysis under flexural and tensile deformations: elastic modulus.
- 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.
- Atomic force (AFM) microscopies.
- Near Edge X-ray Absorption Fine Structure (NEXAFS).
- Resonant Soft X-ray Scattering (RSoXS) Theoretical and mathematical physics.
- Deposition of polymers by Ink-jet.

RESEARCH ACTIVITY:

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

FERROELECTRIC PHASES IN POLYVINYLIDENE FLUORIDE NANOPARTICLES

Within the framework of advanced processing and study of the relationship between the nanostructure and the properties of functional polymers, ferroelectric polyvinylidene fluoride (PVDF) nanoparticles with an average diameter of around 230nm have been prepared using the dialysis precipitation technique, with a d. The ferroelectricity of the nanoparticles has been corroborated using piezoresponse atomic microscopy. The origin of this ferroelectricity is attributed to the presence of electrically active crystalline phases, as we have demonstrated by differential scanning calorimetry, infrared spectroscopy and X-ray diffraction.

MORPHOLOGY OF FUNCTIONAL POLYMER BILAYERS

The morphology and functionality of bilayers formed by a semiconductor polymer substrate (specifically polyhexylthiophene, P3HT), and a ferroelectric polymer coating (copolymers of polyvinylidene fluoride with trifluoroethylene, P(VDF-TrFE).) have been studied. Through the systematic study of the thickness of the substrate and the thickness of the coating, the role of the different components of the surface energy of both layers in the formation of either a continuous coating or a coating with holes ('dewetting' phenomenon) was observed. This work has represented an advance in the understanding of the mechanism of formation of stable coatings and the effective control of the formation of holes in bilayers of functional polymers, of special importance in the fabrication of organic devices based on thin films.

Work on nanostructuring of these bilayers was also carried out, in collaboration with the LANAMAP group of the Blas Cabrera Institute of Physical Chemistry. The conditions for the formation of periodic structures by irradiation by pulsed lasers have been established.

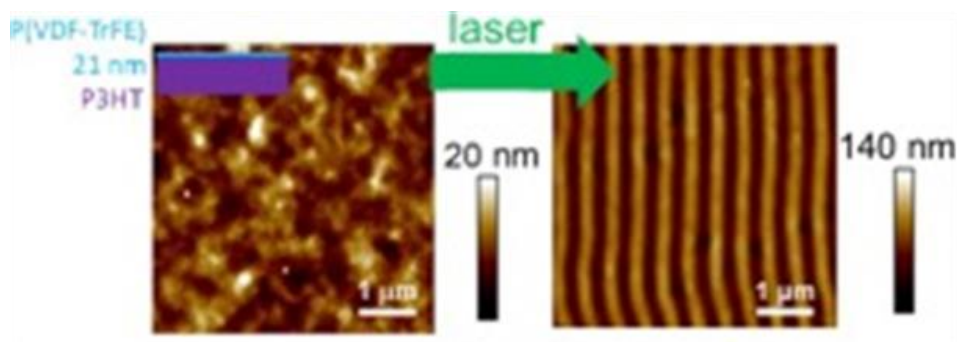
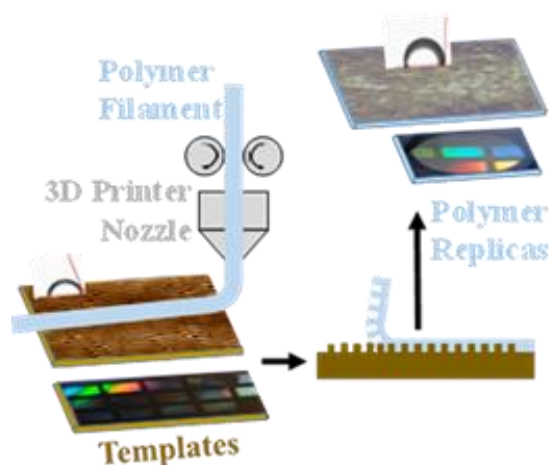


Figure 1. Images by Atomic Force Microscopy of a bilayer made of a semiconducting polymer (P3HT) and a ferroelectric one P(VDF-TrFE)) (Left) and after Laser nanostructuring (Right).

DEVELOPMENT OF A NOVEL PRINTED-ASSISTED NANOIMPRINT LITHOGRAPHY CONCEPT (3DPrANIL).

Fused filament fabrication, commonly referred to as 3D printing, is an additive manufacturing method finding plenty of applications nowadays. In contrast, polymer nanopatterning by nanolithographic techniques plays an important role in obtaining functional surfaces and coatings for applications in different fields including micro- and nanoelectronics. We have demonstrated that by employing conventional 3D printing, it is possible to fabricate nanostructured polymer surfaces in a relatively simple way by using similar approaches as those used in nanoimprint lithography but without the need for clean room conditions. To do that, a printed-assisted nanoimprint lithography concept (3DPrANIL) has been developed and tested for different types of polymer and silicon templates. It is demonstrated that a polymeric nanostructured hydrophilic template can be replicated accurately on another polymer rendering a nanostructured surface with enhanced hydrophobicity. The results support 3DPrANIL as novel method to obtain micro- and nanostructured surfaces with different functionalities like iridescence and hydrophobicity.

Figure 2. Schematic view of the Printed-Assisted Nanoimprint Lithography concept (3DPrANIL): A molten polymer filament is deposited by 3D printing over a structured substrate. By convenient conditions the structure of the substrate can be replicated in an efficient way in the solidified polymer.



ACTIVITIES IN COLLABORATION WITH THE SPANISH SYNCHROTRON ALBA

Proposal of a new experimental beamline for ALBA II

A new experimental beamline (BRISA) has been proposed for construction after the upgrade that will take place at the Spanish synchrotron during the next years. The proposed beamline consists of two endstations, both are soft X-ray microscopes, focused by reflecting optics to obtain nanofocused beams. One of the experimental stations (BRISA E1) will address issues related to energy production and storage, environmental sustainability and health, while the other endstation (BRISA E2) will focus on the development of a sustainable digital transformation.

Implementation of an experimental device for simultaneous measurements of structure, mechanical properties and fluorescence at the ALBA synchrotron.

A fluorescence spectrophotometer has been implemented to follow in-situ the emitted fluorescence, simultaneously to changes in structural features by SAXS/WAXS, of silk fibroin films under mechanical stretching. The experiments have been successfully performed at the NCD-SWEET beamline of the ALBA synchrotron.

Group of BIOPHYSICS OF MACROMOLECULAR SYSTEMS

General aspects of the research

Our research activities have encompassed both experimental and simulation work within the scope of the "Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling (EcoPOL)" project, funded by the MCINN in mid-2020. Additionally, collaborative efforts have commenced been done under two Ecological and Digital Transition (TED) research projects, one in partnership with Rey Juan Carlos University and IMDEA Energy, and the other with the Zaidin Experimental Station of CSIC (Granada). These projects focus on polymer recycling and the development and characterization of biopolymers derived from natural sources. Progress has also been made in a project investigating treatments for metastatic breast cancer using monoclonal antibodies, conducted under contract with the Vall d'Hebrón Hospital Foundation. Furthermore, a research contract has been established with the "Contigo against breast cancer" Foundation, focusing on the "in silico" study of conjugated monoclonal antibodies. Collaboration contracts with the international company Total Energies have also been developed. Notably, our collaboration with researchers from the ICTP, the UAH, and the UPV/EHU has yielded significant results. Details regarding the main activities and outcomes of these diverse projects are provided below.

Editorial for the special issue "In memoriam of Javier Martínez-Salazar"

We have edited a special issue of the Polymer Journal (Elsevier) comprising four featured articles and fourteen regular articles in memory of our late colleague, Javier Martínez-Salazar. Prof. Javier Martínez-Salazar earned his Ph.D. in Physics from the Autonomous University of Madrid in 1979, focusing on the application of X-ray diffraction to semicrystalline polymers. His seminal work, documented in his thesis, was later reviewed in a classic book on Polymer Physics by B. Wunderlich in "Macromolecular Physics," Vol. 3, 1980. During his postdoctoral tenure, he collaborated with Prof. Andrew Keller's group at the HH Wills Physics Laboratory in Bristol (1979-1983), where he made significant contributions to the study of self-nucleation in semicrystalline polymers, pioneering a new research direction that profoundly impacted the field. Prof. Martínez-Salazar was also a

trailblazer in the application of synchrotron light to polymer research, visiting the Daresbury Laboratory in the early 1980s to explore the early stages of crystal growth during polymer crystallization. He has been an essential figure in the functioning of both the IEM and CSIC for the last 30 years.

Sustainable polymers for circular economy

Melt-processed polylimonene oxide/polylactic acid blends

Sustainable polymers play a crucial role in advancing the principles of a circular economy by offering environmentally friendly alternatives to traditional fossil-based plastics. We have focused on the development of novel polymer blends and additives derived from renewable resources, aiming to enhance the properties of biodegradable polymers such as polylactic acid (PLA). One aspect of our work involved the optimization of the polymerization process for limonene oxide (LO) using aluminum-based catalysts. This resulted in the synthesis of polylimonene oxide (PLO), a fully bio-based ether with promising thermal stability and low molecular weight. We investigated the potential of PLO as a sustainable additive for PLA by preparing blends through melt processing. Remarkably, the incorporation of a small amount of PLO led to significant changes in the thermal and mechanical properties of PLA. Notably, we observed a decrease in the glass transition temperature of PLA and an increase in its flexibility, indicating strong interactions between PLO and PLA and suggesting partial miscibility between the components. This work has been done in collaboration with the UAH.

Synthesis of polymyrcene and polyanethol and application as sustainable additives for poly (lactic acid)

In another aspect of our research, we explored the synthesis of polymers from bio-based monomers myrcene and anethole using a catalytic system based on silsesquioxane-cyclopentadienyl titanium complexes. These polymers, polymyrcene (PM_y) and polyanethol (PAN), were then evaluated as additives for PLA to improve its material properties. The addition of PM_y to PLA resulted in a decrease in the glass transition temperature and promoted PLA crystallization, leading to enhanced mechanical properties and reduced fragility compared to pure PLA. On the other hand, PAN inhibited PLA crystallization and resulted in immiscible blends with well-dispersed phases. Although the PLA/PAN blends exhibited higher tensile modulus than pure PLA, they showed increased fragility upon the addition of PAN. Overall, our research demonstrates the potential of sustainable polymers and additives derived from renewable resources to enhance the performance of biodegradable polymers like PLA. By advancing the development and application of these materials, we contribute to the realization of a circular economy model that prioritizes environmental sustainability and resource efficiency. This work has been performed in collaboration with the UAH.

Polymers with new applications: conductive textiles

Polymers with innovative applications, such as conductive textiles, open up new avenues for technological advancements in various industries. In our research in collaboration with researchers of the ICTP (CSIC), we have explored the potential of combining polyethylene terephthalate (PET), a widely used polymer in the textile industry, with graphene, a highly acclaimed conductive material, to create conductive textile materials with enhanced properties. This study focuses on developing mechanically robust and conductive polymer

textiles through the incorporation of graphene into PET fibers. We employed the dry-jet wet-spinning method to prepare PET/graphene fibers from nanocomposite solutions in trifluoroacetic acid. Nanoindentation analysis revealed significant enhancements in modulus and hardness (approximately 10%) upon the addition of a small amount of graphene (2 wt.%) to the glassy PET fibers. This improvement can be attributed not only to the inherent mechanical properties of graphene but also to the promotion of crystallinity within the composite fibers. Further investigations demonstrated that higher loadings of graphene (up to 5 wt.%) led to additional mechanical improvements of approximately 20%, primarily attributed to the superior properties of the graphene filler. Additionally, the nanocomposite fibers exhibited an electrical conductivity percolation threshold beyond 2 wt.%, reaching approximately 0.2 S/cm for the highest graphene loading. Importantly, bending tests conducted on the nanocomposite fibers revealed that their excellent electrical conductivity could withstand cyclic mechanical loading, highlighting their durability and stability under real-world conditions. These findings underscore the potential of PET/graphene nanocomposite fibers for various applications in the textile industry, including wearable electronics, smart textiles, and sensor technology. By harnessing the unique properties of graphene, we pave the way for the development of next-generation conductive materials with enhanced performance and functionality, contributing to the advancement of diverse technological fields.

Biophysics of macromolecular systems

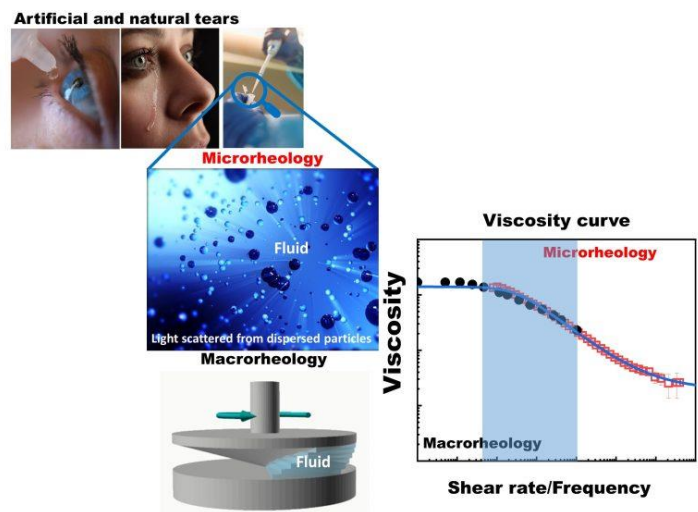
Biophysics of monoclonal antibodies for breast cancer

The biophysical interactions between monoclonal antibodies (mAbs), specifically trastuzumab and pertuzumab, and the human epidermal growth factor receptor 2 (HER2) protein in breast cancer have been comprehensively investigated through a combination of experimental and computational approaches. Our experimental methodology involved utilizing the complete IgG form of the antibodies and the extracellular domain of the HER2 protein in solution, mimicking the physiological conditions present in the tumor microenvironment. Dynamic light scattering and size exclusion chromatography coupled with tetra detection were employed to characterize the protein complexes, quantify their concentrations, and calculate the equilibrium-free binding energy (ΔG_{bind}). Additionally, we utilized the PRODIGY model, a QSAR-like model with excellent predictive ability, to estimate ΔG_{bind} values in silico. Our findings reveal that pertuzumab exhibits a slightly higher binding affinity to HER2 compared to trastuzumab. This difference in binding affinity was elucidated by analyzing the contribution of various interfacial contact (IC) descriptors to the ΔG_{bind} value predicted by the PRODIGY model. Furthermore, our experimental results demonstrated that the pertuzumab IgG antibody preferentially binds to two HER2 proteins, one per Fab fragment, whereas trastuzumab primarily forms a monovalent complex. This observation was interpreted using a geometric model, which identified steric crowding in the trastuzumab–HER2 complex relative to the pertuzumab–HER2 complex. By integrating experimental data with computational predictions, we have gained valuable insights into the molecular mechanisms underlying the interactions between mAbs and HER2 in breast cancer. These findings contribute to our understanding of the pharmacological properties of therapeutic antibodies and have implications for the development of more effective treatment strategies targeting HER2-positive breast cancer. Moreover, our approach highlights the importance of employing multidisciplinary techniques to elucidate complex biological processes, paving the way for personalized and precision medicine approaches in oncology.

Breaking into tears with microrheology

This groundbreaking study, recently published in the journal "Physics of Fluids," has garnered significant recognition, with the editor designating it as a "feature article" in the special volume titled "Flow and the Eye." Investigating the viscoelastic characteristics of biological fluids, including hyaluronic acid-containing lubricating eye drops and human tears, our research employed cutting-edge passive microrheology techniques. By tracking the Brownian motion of tracer particles with varied sizes within these fluids, we gained valuable insights into their viscoelastic nature. The results unveiled intriguing revelations, showcasing how the viscoelastic properties of artificial tears mirror those of unentangled semidiluted solutions, with characteristics such as Newtonian viscosity and relaxation time scaling in accordance with the concentration and macromolecular size of hyaluronic acid. Notably, our investigation unearthed that human tears exhibit a viscosity 50% greater than that of pure water, akin to artificial tears containing 0.1% hyaluronic acid. However, their relaxation time was observed to be one order of magnitude longer than standard ophthalmic solutions, underscoring the complexity of their composition. What sets this study apart is its pioneering approach in measuring the rheological properties of human tears—a biofluid of immense interest—using minuscule sample volumes. The methodology enabled us to glean comprehensive insights across a broad spectrum of frequencies, even approaching those corresponding to blinking, in accordance with the Cox–Merz rule. The implications of these findings are profound, as they lay the foundation for future investigations into tear dynamics among ophthalmic patients, offering a novel path for understanding and addressing ocular health challenges. This research has garnered significant attention across various platforms, including news outlets, blogs, and interviews, highlighting its impact on advancing our understanding of tear physiology and its potential applications in clinical settings. This work has been done in collaboration with the POLYMAT (UPV/EHU), Donostia Hospital and Begitek clinic.

Figure 3. Exploring the properties of minute liquid volumes, such as tears and eye drops, demands innovative methodologies. In this study, researchers fused two established techniques and tailored them for microscale applications: dynamic light scattering (DLS), a method that involves illuminating liquids to observe the scattering of light off suspended particles, and rheological approaches, which assess the viscosity and stress resistance of liquids by inducing flow under various geometries like plates or cones.



CAPÍTULO 3 – PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3 – RESEARCH PROJECTS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

El Universo Gravitacional Cuántico: Gravedad Cuántica, Cosmología Cuántica de Lazos y Ondas Gravitacionales.

Code or Reference: PID2020-118159GB-C41.

Funding Institution: MICINN.

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

Duration: September 2021-August 2024.

Objectives: Consequences of the quantum nature of spacetime. Predictions of Loop Quantum Gravity, multi-fractional gravity with fractional derivatives and non-local quantum gravity. Gravitational-wave phenomenology of these theories, with reference to the future interferometers LISA and Einstein Telescope.

Campos y gravedad: fronteras, física estadística y efectos de memoria.

Code or Reference: PID2020-116567GB-C22

Funding Institution: MICINN.

Main Researchers: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor y Jesús Fernando Barbero González

Duration: September 2021-2024

Objectives: Study different aspects of field theories in bounded spacetime regions and problems in statistical physics.

Métodos de pocos y muchos cuerpos aplicados al estudio de núcleos exóticos.

Code or Reference: 2022AEP002

Funding Institution: CSIC

Main Researchers: Pedro Sarriguren and Eduardo Garrido.

Duration: January 2023 – September 2023.

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

Estudios teóricos sobre estructura y reacciones de núcleos exóticos.

Code or Reference: PID2022-136992NB-I00.

Funding Institution: MICINU

Main Researchers: Eduardo Garrido.

Duration: September 2023 – September 2027.

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

Cold Atom Physics Spain.

Code or Reference: RED2018-102488-T

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Alessio Celi (UB). Participation Rafael Alejandro Molina Fernández.

Duration: January 2023-December 2024.

Objectives: Spanish network for cold atom physics.

Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS).

Code or Reference: H2020-MSCA-RISE-2019-ATMOS-872081.

Funding Institution: European Commission.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: April 2020-April 2024.

Objectives: Collaborative study of pollutants: identification, reactivity and capture. ATMOS represents a network of 11 institutions.

Caracterización espectroscópica de moléculas no-rígidas y detectables en atmósferas, mediante métodos ab initio altamente correlacionados.

Code or Reference: PID2020-112887GB-I00.

Funding Institution: MINECO.

Main Researcher: María Luisa Senent Diez.

Duration: September 2021-August 2024.

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

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

Metastable and active carbon-based materials for the storage and management of clean energy – novel physico-chemical strategies (MACMAT).

Code or Reference: TED2021-129457B-I00

Funding Institution: Ministerio de ciencia e innovación- Unión Europea, NextGenerationEU

Main Researchers: Felix Fernandez Alonso, Pedro Braña Coto

Duration: 1 December 2022–1 December 2023

Objectives: Study of processes and materials relevant for energy storage and management.

Bound-states-In-the-Continuum-based PLANar photonic devices towards 6G (BICPLAN6G).

Code or Reference: TED2021-131417B-I00.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researchers: Vincenzo Giannini/José A. Sánchez Gil.

Duration: December 2022-December 2024.

Objectives: In this project, we plan to explore novel Bound-states-In-the-Continuum (BIC)-induced phenomenology emerging in planar arrays of metallic/semiconducting micron-size particles (called metasurfaces) in the THz and GHz domains with the aim of finding disruptive functionalities leading to planar (passive and active) photonic devices in those spectral domains, that could be ultimately used as energy harvesters, wireless power transfer

and sensors, with obvious interest in digital transition to the 5G and 6G regimes. These subject matters are nowadays in the forefront of THz Photonics.

Explorando interacción y fuerzas luz-materia en redes complejas de partículas (LIGHTCOMPAS).

Code or Reference: PID2022-137569NB-C41.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researchers: Antonio García-Martín/José A. Sánchez Gil.

Coordinator: José A. Sánchez Gil.

Duration: December 2023-December 2026

Objectives: The aim of the present proposal is the development (based on previously acquired experience and knowledge) of new theories, conceptual models, computational tools, and experimental activities, able to explain and understand the rich phenomenology that emerges from the interaction of light with complex systems exhibiting various optical responses, including the optical forces exerted on them. Complexity may arise from a peculiar arrangement (arrays of nano- and micro-structures), a singular response (non-reciprocal, reactive or thermally activated) or a unique illumination (structured or fluctuating radiation). The response emerging from these interactions will be analyzed in cutting-edge experimental work, not only from the project teams, but also from other international groups. These subject matters are nowadays at the forefront of Physics in general, and Optics/Photonics and Condensed Matter in particular.

Multiplexing Molecular Sensing and Dynamics Based on Plasmonic Effects Generated by Nanostructures.

Code or Reference: PID2020-113900RB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Santiago Sanchez Cortés.

Duration: September 2021- September 2024

Objectives: Application of plasmonic effects of nanostructures on the molecular detection of pollutants, biomolecules and materials with interest in the Cultural Heritage. Design and implementation of engineering commercial nanosensors based on plasmonic effects

Development of nanosensor photonic systems for rapid virus detection using controlled evolution methods of protein platforms: the case of SARS-CoV-2

Code or Reference: 313011AUW6

Funding Institution: European Union

Main Researcher: Pavol Miskovsky

Duration: January 2021-June 2023

Objectives: Development of nanosensory photonic systems for rapid virus detection using controlled evolution methods of protein platforms: the case of SARS-CoV-2

Open Scientific Community for Modern Interdisciplinary Research in Medicine (OPENMED)

Code or Reference: 313011V455

Funding Institution: European Union

Main Researcher: Gabriel Zoldak

Duration: November 2019-June 2023

Objectives: The aim of the project is to solve selected problems of diagnosis and treatment of oncological, cardiovascular and viral diseases, diseases of the CNS and diseases of the musculoskeletal system with a unique use of the potential of partners in the project.

Atrévete a ser científica: promoviendo las vocaciones científicas entre las adolescentes a través de la visibilización de las científicas y de los sesgos de género en la elección de las carreras STEM.

Code or Reference: FCT-20-16933

Funding Institution: FECYT

Main Researcher: Sagrario Martínez Ramírez

Duration: July 2022-June 2023

Objectives: visibilizar la labor de las mujeres que trabajan en Ciencia, Tecnología, Ingeniería y Matemáticas (STEM, acrónimo de las siglas en inglés de Science, Technology, Engineering and Mathematics) con el fin de fomentar la incorporación de las jóvenes a dichas disciplinas, creando referentes a través de las biografías de mujeres científicas

Mitigación del calentamiento urbano en Iberoamérica a través de la respuesta termoóptica de los materiales de construcción.

Code or Reference: INCGLO0008

Funding Institution: FGCSIC

Main Researcher: Gloria Pérez

Duration: January 2021-December 2023

Objectives: la identificación de estrategias para mitigar el sobrecalentamiento en ciudades iberoamericanas mediante materiales de acabado superficial sostenibles y con propiedades termo-ópticas que optimicen la gestión de la energía solar.

Desarrollo de un mortero de cal para enlucidos con características fungicidas y biocidas

Code or Reference: 2020-2021-3B1-205

Funding Institution: FONDOCYT

Main Researcher: Esteban Prieto Vicioso

Duration: January 2022-December 2023

Objectives: Desarrollar un mortero de cal para enlucidos con características fungicidas y biocidas para la conservación y restauración de edificaciones históricas con muros de obra de fábrica y tapia, tanto en el exterior como en el interior de estas.

Circularidad y descarbonatación del cemento y productos derivados investigando técnicas de carbonatación de residuos alcalinos Code or Reference: PID2021-122390OB-C21

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Moisés Frías

Duration: 2022-December 2025

Objectives: Establecer las bases científicas y tecnológicas de las eco-matrices de cementos fabricados con residuos industriales de naturaleza alcalina mezclando con biomásas y residuos de construcción y demolición.

Dinámica y Estructura de Nucleos Exóticos Estudiados en Experimentos

Code or Reference: PID2019-104390GB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Olof Tengblad.

Duration: July 2020 – December 2023

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

Estudios experimentales de núcleos exóticos

Code or Reference: PID2022-140162NB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Olof Tengblad, Bruno Olaizola

Duration: September 2023-August 2026

Objectives: This project aims to generate basic knowledge by studying the fundamental properties of the atomic nuclei. By doing so we will increase the understanding of the nuclear structure, of the interplay between the constituents of the atomic core, and to understand the origin of the elements in the universe.

ASAP-CM Advanced strategies and new approaches for protontherapy

Code or Reference: ASAP-CM P2022/BMD-7434

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Olof Tengblad y Maria José G. Borge

Duration: September 2023 - August 2026

Objectives: The project aims to develop strategies to enhance the effects of radiotherapy by identifying the genes involved in radioresistance and the use of nanoparticles and immunotherapy, as well as investigating the use of very high rate radiation (FLASH) in proton therapy.

EURO-LABS

Code or Reference: EU grant 101057511

Funding Institution: European Union

Main Researcher: Maria José G. Borge

Duration: September 2022 – August 2026

Objectives: Fostering the sharing of knowledge and technologies across scientific fields; To create synergies and collaborations between the RIs of the Nuclear and High Energy communities;

Building up a super community of sub-atomic researchers and the associated technical staff; Enhancing Europe's potential for successfully facing the upcoming new challenges of the coming decades.

MRR-ISRS-SPAIN

Code or Reference: CIE2301005

Funding Institution: MICIN-MRR-Next generation EU

Main Researcher: Teresa Kurtukian

Duration: September 2023 – December 2025

Objectives: Design of a prototype for the ISRS (ISOLDE Recoil Separator) a novel high-resolution magnetic separator that is to be installed at HIE-ISOLDE, CERN's high-energy radioactive beam facility.

MRR-HISTARS

Code or Reference: CIE202301006

Funding Institution: MICIN-MRR-Next generation EU

Main Researcher: Olof Tengblad

Duration: September 2023 – December 2025

Objectives: Design and construction of a fast-timing array of detectors for use in medium energy reaction experiments at the Miniball facility at HIE-ISOLDE.

Estudios contemporáneos experimentales y teóricos de la estructura nuclear de núcleos exóticos

Code or Reference: PID2020-118265GB-C41

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researchers: Andrea Jungclaus, K. Wimmer

Duration: September 2021-August 2024

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

Estudios de coincidencias ultra-rápidas de núcleos exóticos con implicaciones para la investigación multidisciplinar

Code or Reference: RYC2021-031494-I

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researcher: Bruno Olaizola

Duration: January 2023-December 2027

Objectives: The experimental study of the structure of neutron-rich exotic nuclei. We also study exotic decay modes, such as the emission of protons by neutron-rich nuclei or the possibility of quasi-free neutrons decay into dark matter.

Explorando la coexistencia de formas a través de $N=60$ en Sr-100 usando IDS

Reference: PIE-20235AT018

Funding Institution: 80% CSIC – 20% IEM

Main Researcher: Bruno Olaizola

Duration: September 2023 – September 2026

Objectives: Study of the unique nuclear phenomenon of shape coexistence in exotic, neutron-rich Sr isotopes. In a series of experiment using fast timing, conversion electron spectroscopy and gamma-gamma angular correlations, the 0^+ character of states in the isotopic chain will be firmly established.

DeepHyp - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei

Reference: 2019-T1/TIC-13194

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: March 2020-February 2024

Objectives: Study of exotic hypernuclei in high energy nuclear collisions. Development of machine and deep learning techniques for improving the experimental spectroscopy of hypernuclei.

Hyp@FRS - Machine learning methods applied to the spectroscopy of Hypernuclei: the puzzle of the hypertriton lifetime and of the $nn\Lambda$ existence studied at WASA@FRS

Reference: PID2020-118009GA-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación - Proyectos I+D+i 2020

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: September 2021 – May 2024

Objectives: Lifetime of hypertriton. Existence of $nn\Lambda$. Development deep learning techniques for tracking in magnetic field & ion-optics. Development of electronic readout for silicon micro vertex detector.

NewHyp - New developments based on machine learning techniques in the search for hypernuclear signals in the 6Li-12C and 12C-12C collisions of WASA-FRS HypHI experiment

Reference: CNS2022-135768

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación - Consolidación Investigadora - 2022

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: July 2023 – July 2025

Objectives: identify and reconstruct $3\Lambda\text{H}$, $4\Lambda\text{H}$, $n\Lambda$, $9\Lambda\text{B}$ in 6Li-12C and 12C-12C collisions. Development deep learning techniques for improving signal-to-background ratio of hypernuclear signals. Development new backend electronics for silicon detectors and improvement of DAQ with data compressor method for flash ADC based on machine learning.

DeepHyp 5º - Deep learning techniques for the study of exotic hypernuclei

Reference: 2023-5A/TIC-28925

Funding Institution: Comunidad de Madrid

Main Researcher: Christophe Rappold

Duration: February 2024 - February 2025

Objectives: Analysis of WASA-FRS and JPARC E07 experiments for study of hypernuclei by means of machine learning algorithm. Improvement of the primary vertex determination with AI. Segmentation model for nuclear emulsion images for search hypertriton and double strangeness hypernuclei. Development of tracking trigger for micro-vertex system.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere (ATMOS)

Code or Reference: H2020-MSCA-RISE-2019-87208

Funding Institution: EUROPEAN COMMISSION. Horizon 2020 Research and Innovation Framework Programme

Main Researcher: M^a Luisa Senent Díez

Duration: April 2020-January 2026

Objectives: Collaborative effort on scientific problems related to atmosphere pollution elements, with an emphasis on training graduated students in atmospheric sciences, in state-of-the art experimental and theoretical studies of gas phase molecular systems, and their interactions with solids.

Diagnóstico Raman avanzado: Microfluídica, colisiones moleculares y procesos fuera del equilibrio

Code or Reference: PID2021-123752NB-I00

Funding Institution: MICINN (Ministerio de Ciencia e Innovación)

Main Researcher: Guzmán Tejeda Gala y José M. Fernández Sánchez

Duration: September 2022-August 2025

Objectives: Experimental study of inelastic intermolecular collisions involving small molecules that play important roles in atmospheric, astrophysical, and combustion processes, and development of non intrusive Raman diagnostics in rarefied gas microflows.

Caracterización estática y dinámica de CO₂ atmosférico: una contribución a mejores modelos climáticos

Code or Reference: TED2021-129619B-I00

Funding Institution: MICINN (Ministerio de Ciencia e Innovación)

Main Researcher: José M. Fernández Sánchez

Duration: December 2022-November 2024

Objectives: Quantitative characterization of vib-rotational Raman spectrum of CO₂ for remote sensing by Raman-LIDAR, and relaxation of hot CO₂ by inelastic collisions with N₂ and O₂.

Ligando gas, hielo y polvo: Astrofísica de laboratorio

Code or Reference: PID2020-113084GB-I00

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación

Main Researchers: María Belén Maté and José Luis Doménech Martínez

Duration: 01/09/2021 – 31/08/2024

Objectives: Astronomical observations with cutting-edge instrumentation, laboratory high level experiments, theoretical work and models provide the tools to unveil our astrochemical origins. Expert teams in all these disciplines join forces in this project to study interstellar carbonaceous materials, ices and molecules, as they are key ingredients in astrochemical and astrophysical processes, as well as precursors of life on Earth.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Multidimensional micro and nano structuring of polymer materials by advanced technologies: from the fundamentals to the applications.

Code or Reference: PID2019-107514GB-I00

Funding Institution: AEI, MICINN.

Main Researcher: Aurora Nogales, Tiberio Ezquerra.

Duration: 1/06/2020-31/05/2023

Objectives: Understanding the underlying physics of polymer nanostructuring and its implications for applications as functional materials.

Green processing of regenerated silk by multiple-scale structuring: from the fundamentals to the applications.

Code or Reference: TED2021-129845B-I00

Funding Institution: AEI, MICINN.

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez, Aurora Nogales Ruiz

Duration: 1/12/2022-30/11/2024.

Objectives: Investigation of natural silk processing methods aimed at obtaining functionalities through nanostructuring.

Advanced Micro and Nanoprocessing of Polymer Materials: Structure-Properties-Applications Interrelationships.

Code or Reference: PID2022-138635NB-I00

Funding Institution: AEI, MICINN.

Main Researcher: Aurora Nogales Ruiz, Mari Cruz García Gutiérrez

Duration: September 2023-August 2026.

Objectives: Study of the relationships between structure, properties and applications in functional polymers subjected to advanced processing.

Eco-Design of Packaging Commodity Polymers by Validated Multiscale Modelling (EcoPOL)

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: Javier Ramos and Juan Francisco Vega

Other Participants: Víctor L. Cruz, Maria T. Expósito and Virginia Souza-Egipsy

Duration: 1st June 2020 – 29th February 2024

Objectives: Understanding of the interactions between the polymeric components usually found in multilayer films used in packaging by means of the multiscale modeling at different length-time scales.

Simulation of passive diffusion in cell membrane models of drugs applied in breast cancer therapies

Funding Institution: CSIC (PIE202350E113)

Main Researchers: Juan Francisco Vega and Javier Ramos

Other Participants: Víctor L. Cruz y Emma Franco Mateos

Duration: 1st June 2022 – 30th November 2025

Objectives: Study of the bystander effect of new therapies against the breast cancer based on monoclonal antibodies.

Experiments and modeling applied to the rheology of polymers with complex molecular topology

Funding Institution: CSIC (PIE202250E035)

Main Researchers: Juan Francisco Vega

Other Participants: Javier Ramos and Andrés Cardil

Duration: 1st march 2022 – 29th February 2025

Objectives: Understanding of the viscoelastic properties of polymers and the relationship with the molecular architecture.

Circularidad de los residuos plásticos de automoción: reciclado mecánico (CIRCLAPAR)

Funding Institution: MICINN

Main Researchers Rafael García y Rafael van Rieken (ESCET/URJC)

Other Participants: Javier Ramos and Juan Francisco Vega

Duration: 1st December 2022 – 30th November 2024

Objectives: Mechanical recycling of polymeric residues from automotive industry.

Nuevos polímeros bacterianos: aprovechando los recursos eco-renovables (BACTOPOL)

Funding Institution: MICINN

Main Researchers: Daniel Pérez Mendoza y Juan Sanjuan Pinilla (EEZ/CSIC)

Other Participants: Javier Ramos and Juan Francisco Vega

Duration: 1st December 2022 – 30th November 2024

Objectives: Obtention and characterization of new biopolymers obtained from sustainable resources.

Estudios de la formación de complejos en disolución entre el dominio extracelular HER2 y anticuerpos monoclonales de relevancia en el cáncer de mama

Code or Reference: Research Agreement N° 20196519

Company: Fundación Instituto de Investigación Oncológica Vall d'Hebron

Main Researcher: Juan Francisco Vega

Other Participants: Víctor L. Cruz, Javier Ramos and Virginia Souza-Egipsy

Duration: 1st of December 2019 - 31st of May 2023

Budget: 104.06 k€

Objectives: Dual study of antibody-HER2 interactions with special relevance to biosimilar products.

In-silico evaluation of the by-stander killing effect of antibody drug conjugates in the treatment of breast cancer

Code or Reference: Research Agreement N° 20230008

Company: Fundación Contigo

Main Researchers: Juan Francisco Vega and Javier Ramos

Other Participants: Víctor L. Cruz

Duration: 27th December 2022 – 30th June 2024

Budget: 73.0 k€

Objectives: In-silico study of antibody-drug conjugates used in breast cancer therapies

Molecular characterization of commercial polyolefins

Code or Reference: Services Agreement N° 20238570

Company: Total Energies One Tech Belgium

Main Researchers: Juan Francisco Vega

Other Participants: Javier Ramos and Andrés Cardil

Duration: 1st September 2023 – 30th August 2024

Budget: 85.0 k€

Objectives: Rheological characterization and computational analysis of polymeric samples

CAPÍTULO 4 – COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4 – SCIENTIFIC COOPERATION

CONGRESOS Y REUNIONES - *Congresses and Meetings*

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

CDT & friends, jubilee edition. (International non-UE congress), Nijmegen (The Netherlands), 25th-27th of January 2023.

- *Hamiltonians and quantum gravity: present and future* (Invited talk), Jesús Fernando Barbero González.

GEFES 2023 (National congress), Salamanca (Spain), 1st-3rd of February 2023.

- *Models of screening in intrinsic disordered graphene* (Poster), Marta García Olmos.

X Tux Workshop on Quantum Gravity (International non-UE congress), Tux (Austria) + online, 13th-17th of February 2023.

- *Loop Quantization of the Ashtekar-Olmedo-Singh Model* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán, Alejandro García-Quismondo, Beatriz Elizaga Navascués, and Andrés Mínguez Sánchez.

Workshop CSIC Strategic Theme: Understanding the basic components of the Universe, its structure and evolution (National congress), Madrid, 22nd-23rd of February 2023.

- *Gravity – A challenge for the XXI century* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.
- *Origin and fate of the Universe* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

QTYR23 (National congress), Madrid (Spain), 3rd-7th of March 2023.

- *Effect of the external fields in high Chern number quantum anomalous Hall insulator* (Contributed talk), Yuriko Baba, Francisco Domínguez-Adame, Rafael Molina.

APS March Meeting 2023 (International non-UE congress), Las Vegas (USA), 5th-10th of March 2023.

- *Spin-valley locking and universal mechanism of Ising superconductivity in twisted bilayer, trilayer and quadrilayer graphene* (Oral contribution), José González and Tobias Stauber.

DPG Spring Meeting (International UE-congress), Dresden (Germany), 26th-31st of March 2023.

- *Effect of the external fields in high Chern number quantum anomalous Hall insulator* (Contributed talk), Yuriko Baba, Francisco Domínguez-Adame, Rafael Molina.

MTM-ATMOS 2023. Greenhouse gases and pollutants (International non-UE congress), Madrid, 27th-31st of March 2023.

- *Highly correlated ab initio calculations applied to the study of OVOCs containing (at least) three interacting large amplitude motions* (Invited talk), M.L. Senent.
- *Spectroscopy of relevant non-rigid molecules of atmospheric interest* (Invited talk), S. Dalbouha, M. Mogren Al-Mogren, M.L. Senent.
- *Theoretical spectroscopic study of isopropyl alcohol (CH₃-CHOH-CH₃)* (Invited talk), M. Salah, K. Marachi, N. Komaha, and M.L. Senent.
- *Spectroscopic study of dimethyl peroxide and methoxymethanol, two species of atmospheric interest showing three large amplitude motions* (Invited talk), D. Missaoui, F. Najjar, M.L. Senent.
- *Theoretical structural and spectroscopic characterization of peroxyacetic acid (CH₃-CO-O-OH). Study of the Far Infrared region* (Invited talk), S. Brahem, O. Yazidi, M.L. Senent.
- *The role of water in the adsorption of Nitro-organics pollutants on Activated Carbon* (Invited talk), C. Adjal, V.T imón, N. Guechtouli, R. Boussassi, D. Hammoutène, M.L. Senent.
- *Theoretical modeling of small pollutant atmospheric molecules filtered by copper squarate* (Invited talk), C. Adjal, N. Guechtouli, V. Timón, R. Boussassi, D. Hammoutène and M.L. Senent.

Jornadas on Universe, Gravity, and Advanced Relativity (National congress), Madrid, 24th of April 2023.

- *The quantum gravitational Universe: quantum gravity, loop quantum cosmology and gravitational waves I* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.
- *The Quantum Gravitational Universe: Quantum Gravity, Loop Quantum Cosmology and Gravitational Waves. Part II* (Invited talk), Guillermo A. Mena Marugán, Jerónimo Cortez, Beatriz Elizaga Navascués, Álvaro Torres Caballeros, and José M. Velhinho.

APS April Meeting 2023 (International non-UE congress), Minneapolis (USA), 24th-26th of April 2023.

- *On the Loop Quantization of an Interior Black Hole Model* (Oral contribution), Beatriz Elizaga Navascués, Alejandro García-Quismondo, and Guillermo A. Mena Marugán.

Montevideo Workshop on Gravity and Quantum Field Theory (International non-UE congress), Montevideo (Uruguay), 15th-17th of May 2023.

- *Non- Oscillating Vacua and Loop Quantum Gravity Effects in Primordial Power Spectra* (Oral contribution), Guillermo A. Mena Marugán, Beatriz Elizaga Navascués, and Jesús Yébana Carrilero.

PhDay 2023 (National congress), Madrid (Spain), 7th of June 2023.

- *Semidirac Hamiltonian: A promising option for the realization of quantum transport* (Poster), Marta García Olmos.

Advanced Relativity Meeting 23 - JARRAMPLAS 23 (National congress), Almagro, 8th-11th of June 2023.

- *Uniqueness of the Fock Quantization of a Massless Scalar Field in Kantowski-Sachs Geometry through Unitary Dynamics* (Oral contribution), Álvaro Torres Caballeros, Guillermo A. Mena Marugán, Jerónimo Cortez, Beatriz Elizaga Navascués, and José M. Velhinho.

International Symposium on Molecular Spectroscopy 76st- Champaign-Urbana, Illinois (International non-UE congress, online), 18th-23rd of June 2023.

- *Theoretical spectroscopic study of isopropyl alcohol (CH₃-CHOH-CH₃)* (Oral contribution), M.L. Senent and M. Salah.

'Stories in the flatland (with a twist in the end)', symposium in honor of Prof. Francisco Guinea (International UE congress), Madrid (Spain), 22nd-23rd of June 2023.

- *Some memories about the search of non-Abelian gauge fields in graphene materials* (Invited talk), José González.

2023 International Workshop on Microwave Research and Applications (International non-UE congress), Comarruga (Spain), 4rd -7th of July 2023.

- *Floquet Engineering in Dirac Materials* (Invited talk), Rafael A. Molina.

Encuentros Relativistas Españoles y Portugueses 2023. (International non-UE congress), Bilbao (Spain), 17th-21st of July 2023.

- *On the computation of Poisson brackets in field theories* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

Gravity 2023: Dawn of field theoretic approach (International non-EU congress), Kyoto (Japan), 18th-20th of July 2023.

- *Imminent test of quantum gravity with gravitational waves* (Invited talk), Gianluca Calcagni.

Quantum Gravity @ RRI. (International non-UE congress), Bangalore (India), 4th-8th of September 2023.

- *Configuration spaces for Quantum Gravity and QFT's* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

COSMO'23 (International non-EU congress), Madrid, 11th-15th of September 2023.

- *Imminent test of quantum gravity with gravitational waves* (Oral contribution), Gianluca Calcagni.

Emergence of quantum phases in novel materials (National congress), Madrid (Spain), 11th-15th of September 2023.

- *Semidirac Hamiltonian: A promising option for the realization of quantum transport* (Poster), Marta García Olmos.

The 9th Conference of The Polish Society on Relativity. (International non-UE congress), Krakow (Poland), 18th-22nd of September 2023.

- *Hamiltonians and quantum gravity: present and future* (Plenary talk), Jesús Fernando Barbero González.

Critical Stability of Few-Body Quantum Systems (International non-UE congress), Trento (Italy), 23rd-27th of October 2023.

- *Three-body systems confined by an external field* (Invited talk), Eduardo Garrido.

7th Winter Workshop @Valencia (National congress), Valencia, 11th-13th of December 2023.

- *Euclidean self-dual gravity: Ashtekar variables without gauge fixing* (Contribution), Jesús Fernando Barbero González.
- *Extended Phase Space Quantization of a Black Hole Interior Model in Loop Quantum Cosmology* (Oral contribution), Andrés Mínguez Sánchez, Guillermo A. Mena Marugán, and Beatriz Elizaga Navascués.
- *Uniqueness of the Fock quantization of a massless scalar field in Kantowski-Sachs* (Oral contribution), Álvaro Torres Caballeros, Guillermo A. Mena Marugán, Jerónimo Cortez, Beatriz Elizaga Navascués, and José M. Velhinho.
- *Primordial Power Spectrum in Modified Gravity: from Thermodynamics of Spacetime to LQC* (Oral contribution), Antonio Vicente-Becerril, Ana Alonso-Serrano, and Guillermo A. Mena Marugán.

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

Photooptics 2023 (NanoPlasMeta23) (International non-UE congress), Lisboa (Portugal), February 16th-18th of 2023.

- *Near field excitation of bound states in the continuum in metasurfaces: unveiling symmetry protection and lateral confinement* (Invited talk), D. R. Abujetas, S. ter Huurne, N. van Hoof, J. Gómez Rivas and J. A. Sánchez-Gil.

III Reunión Anual de Fotónica, (International non-UE congress), Sonora (México), May 8th-9th of 2023.

- *Estados Ligados en el Continuo en Metasuperficies dieléctricas y de grafeno* (Invited talk), J. L. Pura and J. A. Sánchez-Gil.

DINAMO 2023, (International non-UE congress), Svolvær (Norway), June 12th-16th of 2023.

- *Unveiling symmetry protection & confinement of bound states in the continuum in metasurfaces* (Invited talk), A. Buendía, J. A. Sánchez-Gil and V. Giannini.

Conferencia Española de NANOFOTÓNICA 2023 (National congress), Zaragoza (Spain), June 12th-14th of 2023.

- *Engineering Bound States in the Continuum in metasurfaces based on graphene nanodisks arrays* (Contributed talk), J. L. Pura, J. R. Deop-Ruano, A. Manjavacas, J. A. Sánchez-Gil.

II National Conference on Advanced Materials AMATS 2023 (National congress), Zaragoza (Spain), June 13th-15th of 2023.

- *Raman Spectroscopy of InP-InGaP Hetero-Structured Nanowires* (Contributed talk), I. Mediavilla, J. L. Pura, V. Hinojosa, J. Anaya, L. Hrachowina.

XXXVth Congresso de Iniciação Científica da UNESP, Presidente Prudente (Brazil) 19th-20th September 2023.

- *Agregação coloidal induzida pelo pesticida carbendazim: um estudo combinado microscopia eletrônica e espectroscopia* (Oral Communication), I. Bianchi, S. Sánchez-Cortés, C.J.L. Constantino.

De Natura Atramenti. Ricerche sulla materialità della scrittura e della stampa, Venezia (Italia) 16th-18th November 2023.

- *The Chemistry of Iron Gall Inks* (Invited talk). S. Sánchez-Cortés.

NANOP 2023, (International non-UE congress), Barcelona (Spain), November 27th-30th of 2023.

- *Multipolar nature of Bound States in the Continuum for room temperature Exciton-Polariton condensation* (Contributed talk), J.L. Pura, A. M. Berghuis, G. W. Castellanos, S. Murai, D. R. Abujetas, E. van Heijst, M. Ramezani, J. Gómez-Rivas, J. A. Sánchez-Gil.
- *Strong coupling between molecules and topological edge states of arrays of plasmonic nanoparticles* (poster), A. Buendía, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, M. S. Rider.

IV Jornadas anuales de la Plataforma Temática Interdisciplinar Patrimonio Abierto: Investigación y Sociedad (PTI-PAIS) del CSIC, Madrid (Spain) 12th-13th December 2023.

- *Pasado, presente y futuro en la aplicación de técnicas espectroscópicas ópticas para el examen y diagnóstico de materiales del Patrimonio por el grupo TEAMPATRI-IEM* (Invited talk), S. Matínez-Ramírez, M.V. Cañamares, A. Crespo, S. Sánchez-Cortés.

4th Workshop on Anti-Matter, Hyper-Matter and Exotica Production at the LHC: (International Congress), Bologna (Italy), 13th -17th of February 2023.

- *Recent results from the GSI heavy-ion program on hypernuclei* (invited talk) C. Rappold

Nuclear Tapas. The shell model as a cornerstone of Nuclear structure, 27th-28th April, Madrid.

- MJG Borge member of organizing committee

2nd Workshop on Hadron Interactions, Hyper-Nuclei and Exotic Hadron productions at High-Energy Experiments 2023 (international non-UE congress), Tokyo (Japan) 22nd May 2023 C. Rappold.

ARIS (Advances in Radioactive Isotope Science), 4th-9th June 2023, Avignon Francia.

- MJG Borge, presidente de sesión y presentación del poster.
- *Testing the parity inversion in ^{11}Li at the upgraded SEC* by D. Fernandez-Ruiz et al

Proton Emitting Nuclei (PROCON2023) (International Conference), June 25th-30th 2023.

- MJG Borge. Miembro del Comité Organizador.
- *Precise characterization of the β -decay of ^8B to ^8Be* (Talk), D. Fernández Ruiz.

Bound states and particle interactions in the 21st century (International Congress), Trieste (Italy), 03rd–06th July 2023.

- *HypHI and WASA-FRS experiments @ GSI* (invited talk), C. Rappold.
- *Wrap-up (Talk)*, C.Rappold

XXXVII Mazurian Lakes Conference on Physics, Piaski, (Poland), 3rd-9th September 2023.

- *Accurate characterization of the beta decay of ^8B to ^8Be* (Talk, award for the second-best presentation), (To be published as an article in Acta Polonica B), Daniel Fernández.
- *WASA-FRS HypHI Experiment: Study of light hypernuclei* (Talk + Poster), S. Escrig.

L International Meeting on Fundamental Physics and XV CPAN (International congress & national congress), Santander (Spain) 2nd–6th October 2023.

- “WASA@FRS HypHI Experiment: Study of light hypernuclei (Talk), S. Escrig.

Special Colloquium on the Occasion of Christoph Scheidenberger’s 60th Birthday Darmstadt (Germany): 21st November 2023: C. Rappold

ISOLDE Workshop and Users meeting,

- *Accurate characterization of the beta decay of ^8B to ^8Be* (talk, award for the second-best presentation), D. Fernandez Ruiz.

13th International “Hiroshima” Symposium on the Development and Application of Semiconductor Tracking Detectors (HSTD13) (International non-UE congress), Vancouver (Canada), 3rd-8th December 2023.

- *Micro-vertex detection system for the WASA-FRS Experiments* (Poster), S. Escrig

Reuniones de colaboración:

- SuperFRS Experiment collaboration meeting 2023: 26.04.2023, 28.04.2023 (Waldorf, Germany).
- R3B collaboration meeting 22.05.2023, 12:00 – 26.05.2023: Christophe Rappold
- NUSTAR Week 2023: 10 – 13 October: Christophe Rappold, “Micro-vertex detectors for WASA-FRS experiment” Talk by S. Escrig

- SuperFRS Experiment collaboration meeting: 17-16 December: Christophe Rappold & Samuel Escrig
- R3B-meeting 06.11.2023, 13:30 – 10.11.2023 (Mainz Germany): O. Tengblad
- EUROLABS Second Annual Meeting, 9-11 October 2023, Warsaw, Poland. Presentation of activities of WP5.
- ISOLDE Workshop, 28th November-1st December.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM) (National), Madrid, 1st- 3rd February 2023.

- *Rotational and vibrational relaxation of CO₂ in supersonic jets: A fluid dynamic, kinetic and thermodynamic study by Raman spectroscopy* (Oral contribution), Carlos Álvarez, José M. Fernández, and Guzmán Tejada.

ATMOS 2023: Greenhouse gases and Pollutants (International non-UE), Madrid, 27th – 31st March 2023

- *Raman spectroscopy in supersonic jets: a powerful tool for molecular characterization* (Oral contribution), Carlos Álvarez, José M. Fernández, and Guzmán Tejada.

4th European Conference on Non-Equilibrium Gas Flows (International UE), Eindhoven (the Netherlands), 29th–31st March 2023

- *Raman spectroscopic diagnostics of non-equilibrium gas flows: an account from the molecular scale* (Plenary lecture), José M. Fernández

CPPA 2023, XXth International Conference on Plasma Physics and Applications (International congress), Iasi, Romania, 14th-16th June, 2023

- *Growth of Hydrocarbon Interstellar Dust Analogues in Cold Plasmas: From Molecules to Nanoparticles* (Invited talk,) R. J. Peláez, M. Jiménez-Redondo, B. Maté, V. J. Herrero, and I. Tanarro.

76th International Symposium on Molecular Spectroscopy (International non-UE congress), Urbana-Champaign (USA), 19th-23rd June 2024

- *Vibrational and rotational action spectroscopy of H₂C₃H⁺* (Oral contribution), Wesley G. D. P. Silva, Divita Gupta, José Luis Doménech, Eline Plaar, Stephan Schlemmer, Oskar Asvany.
- *Solid indene pure and in water ice: infrared spectra and destruction cross sections* (Oral contribution), Belén Maté, Isabel Tanarro, Victor J. Herrero, Vicente Timón
- *Infrared spectra of phosphine ices* (Oral contribution), J.L. Doménech, V. J. Herrero, I. Tanarro, R. Peláez, V. Timón, B. Maté.

XXXV ICPIG, International Conference on Phenomena in Ionized Gases (International congress), Egmond aan Zee, The Netherlands. 9th-14th July, 2023.

- *Relevance of N₂ addition in the ion composition of C₂H₂ glow discharges* (Poster), I. Tanarro, R. J. Peláez, M. Jiménez-Redondo, V. J. Herrero.
- *Monitoring the carbonaceous interstellar dust analogues growth in cold plasmas by light scattering* (Oral contribution), R. J. Peláez, M. Jiménez-Redondo, B. Maté, V. J. Herrero, I. Tanarro.
- *Behaviour of interstellar dust analogues under interstellar conditions* (Poster), R. J. Peláez, B. Mate, M. Jiménez-Redondo, R. Carrasco-Herrera, D. Iancu, M. Straticiuc, I.C. Gerber, I. Mihaila, I. Topala, I. Tanarro and V. J. Herrero.

VII Reunión de Ciencias Planetarias y Exploración del Sistema Solar, (National Congress), Valladolid, 11th-13th July, 2023.

- *Stability of urea in astrophysical ices* (Oral contribution), Maté, Belén, Herrero, Victor J., Tanarro, Isabel, Jiménez-Serra, Izaskun, Carrascosa, Hector, and Muñoz-Caro, Guillermo
- *Modelling IR/UV-VIS spectroscopy in the search for phosphine across the Solar System* (Poster), Timón, V., Moreno, M.A, Maté, B., Doménech, J. L., Peláez, R. J., Tanarro, I. and Herrero, V. J.

XVII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2023 (International UE), Coimbra (Portugal), 5th–8th September 2023.

- *Raman thermometry of confined gas microflows* (Oral contribution), Guzmán Tejada, Slaven Bajic, Carlos Álvarez, and José M. Fernández.
- *The Raman spectrum of diacetyl revisited* (Poster), Marcos de Lucas, Guzmán Tejada, Carlos Álvarez, José M. Fernández, and Francisco Gámez.
- *Measuring physical quantities of CO₂ by Raman spectroscopy* (Oral contribution), Carlos Álvarez, Guzmán Tejada, José M. Fernández.

International Conference on Research and Applications of Plasmas, PLASMA 2023. (International congress), Warsaw, Poland, 18th-22nd September 2023

- *The chemistry of circumstellar envelopes and carbonaceous interstellar dust: Laboratory studies with cold plasmas* (Invited talk), V. J. Herrero, R. J. Peláez, M. Jiménez-Redondo, B. Maté, and I. Tanarro.

Origin and Fate of Dust in Our Universe (International congress), Gothenburg, Sweden. 25th-29th September, 2023.

- *Plasma generation and characterization of 'dense' and 'fluffy' hydrocarbon cosmic dust analogs* (Poster), R. J. Peláez, M. Jiménez-Redondo, B. Maté, V. J. Herrero, and I. Tanarro.

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR
PHYSICS**

1st Iberian Symposium on Functional Organic Polymers (International congress), Aveiro, 11th-12th May 2023.

- *Development of polar phases in ferroelectric poly(vinylidene fluoride) (PVDF) nanoparticles* (Poster), E Gutiérrez Fernández, J Sena Fernández, E Rebollar, TA Ezquerra, FJ Hermoso Pinilla, M Sanz, O Gálvez, A Nogales.
- *Inter and intra molecular dynamics in poly(trimethylene 2,5-furanoate) as revealed by infrared and Broadband Dielectric Spectroscopies* (Poster), O. Gálvez, O. Toledano, F. J. Hermoso, A. Linares, M. Sanz, E. Rebollar, A. Nogales, M. C. García-Gutiérrez, G. Santoro, I. Irska, S. Paszkiewicz, A. Szymczyk, T. A. Ezquerra.

3rd International Conference on Polymer Process Innovation (PPI) (International congress), Guimaraes, 13th-15th September 2023.

- *Structure development during operando fusing filament fabrication: simultaneous wide and small angle X ray scattering* (Invited Talk), A Nogales, MC García-Gutiérrez, Martínez-García P, J Sena-Fernández, E Rebollar, TA Ezquerra.

1st COST NanoSpace Joint Scientific Meeting, (International congress), Ljubljana (Slovenia), February 9th-10th 2023.

- *Formation of carbonaceous cosmic dust in the circumstellar envelopes of C-rich AGB stars* (Invited talk), G. Santoro, L. Martínez, P. Merino, J.A. Martín-Gago.

19th International Conference on Thin Films, ICTF 2023, (International congress), Burgos (Spain) September 26th-29th 2023.

- *Revisiting the photochemistry of CO₂ molecular ices in dense molecular clouds* (Oral Communication), G. Tajuelo-Castilla, J.A. Martín-Gago, G. Santoro.

11th LIPSS International Workshop (International congress), Madrid (Spain) 27-29 September 2023

- *Effect of Laser Induced Periodic Surface Structures on the wettability and surface energy of polymers* (Oral contribution), P. Martínez-García, T.A. Ezquerra and E. Rebollar.

Jornada PTI FAB3D: Claves para acelerar la innovación con Fabricación Aditiva, Museo Nacional de Ciencias (National congress), Madrid, 19th-20th April 2023.

- *3D Printing Assisted Nano Imprint Lithography of Polymers* (Invited talk), T.A. Ezquerra.

2023 European Material Research Society Meeting (International congress), Francia, 29th May-2nd June 2023.

- *Modification of Kapton wettability by laser nanostructuring.* (Oral contribution), P. Martínez-García, A. Nogales, Ó. Gálvez, M. Sanz, A. Maroto-Valiente, G. Santoro, L. Martínez⁴, Y. Huttel, T.A. Ezquerra, E. Rebollar.

European Young Rheologists Symposium, on-line, 8th-5th May 2023.

- *Computational modeling and the rheological effect of long chain branches* (Oral Contribution), A. Cardil, S. Garrepally, O. Lhost, J.F. Vega.

8th International Conference on Polyolefins Characterization, Valencia 21st– 24th May 2023.

- *The key role of polyolefins for the design of recyclable packaging multilayers* (Oral Contribution), J.F. Vega, V. Souza-Egipsy, B. Paredes J. Ramos.
- *Use of non-linear viscoelastic properties to characterize the polyethylene long chain branching topology* (Talk), A. Cardil, S. Garrepally, O. Lhost, J.F. Vega

I PHDAY Campus Serrano, Madrid (Spain), 7th July 2023.

- *Tears don't fall, they flow* (Poster), A. Cardil, M. Fernández, I. Calafel, I. Martínez-Soroa, A. Pérez Sarriegui, J. Ramos, A. Acera, J.F. Vega.

SEJIPOL 2023: 7th Young Polymer Scientist Seminar, Madrid (Spain), 24th October 2023.

- *Flowing tears: Studying the viscoelastic behavior of the human tear film* (Oral Contribution), A. Cardil, M. Fernández, I. Calafel, I. Martínez-Soroa, A. Pérez Sarriegui, J. Ramos, A. Acera, J.F. Vega.

XIXth International Congress on Rheology, ICR 2024, Athens 29th July– 4th August 2023.

- *On the effect of long chain branching distribution in linear and non-linear rheological properties of polyolefins* (Poster), J.F. Vega, A. Cardil, S. Garrepally, O. Lhost.
- *Viscoelastic properties of artificial and natural tear films* (Poster), A. Cardil, M. Fernández, I. Calafel, I. Martínez-Soroa, A. Pérez Sarriegui, A. Acera, J.F. Vega.

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

Visitors

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

- **Prof. Leonardo Modesto**, SUSTech, Shenzhen, China, 11th-15th of January 2023.
- **Dra. Beatriz Elizaga Navascués**, Louisiana State University, Baton Rouge, USA, 3rd-13th of March 2023 and 15th-24th of September 2023.
- **Dr. Leslaw Rachwal**, Czech Technical University, Prague, Czech Republic, 4th-11th of March 2023.
- **Rahma Boussassi**, USTHB, Algeria, 25th of March-9rd of April 2023.
- **Ayad Bellili**, USTHB, Algeria, 25th of March-9rd of April 2023.
- **Samira Dalbouha**, UMV Rabat, Marruecos, 8th of June-17th of September 2023.
- **Sinda Brahem**, LSAMA, Tunis-El Manar University, 27th of September-31st of December 2023.

- **Dorsal Missoussi**, LSAMA Tunis-El Manar University, 27th of September-31st of December 2023.
- **Ijram Hadj Said**, USTHB, Algeria, 2th of October-31st of December 2023.
- **Dr. Christian Privitera**, Ministry of Economy, Venice, Italy, 7th-10th of November 2023.

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

- **Ms. Francisca Fuenzalida Sandoval**, Erasmus+ Traineeship Program, (PhD thesis), 1st of January– 31st January 2023.
- **Dr. Guilherme Dognani**, postdoctoral stay, State University of Sao Paulo, Presidente Prudente (Brazil), 1st January- 7th June 2023.
- **Mr. Marcelo José Dos Santos Oliveira**, Master student (Master Thesis), State University of Sao Paulo, Presidente Prudente (Brazil), 1st January- 30th April 2023.
- **Dr. María Angélica García Bucio**, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 9th -31st of July 2023.
- **Dr. Maria Repovska**, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 9th -19th of July 2023.
- **Ms. Oumaima Douass**, predoctoral, Faculté des Sciences de Tétouan (Marruecos), 12th of June- 24th of July 2023.
- **Ms. Isabela Bianchi**, State University of Sao Paulo, Presidente Prudente (Brazil), 1st January- 31st of July 2023.
- **Dr. Belén Hernández** Associated Professor, Université Paris 13, Paris, France, 4th -7th of September of 2023.
- **Prof. Felix Fernández Alonso**, leader of the Quantum Beams and Sustainable Materials, Materials Physics Center, Donostia, Spain, 16-21th of October 2023.
- **Dr. Zuzana Jurasekova**, Assistant Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 23rd -31st October of 2023.
- **Dr Kalith Mohamed Ismail Syed Sulaiman**, Member of the Quantum Beams and Sustainable Materials, Materials Physics Center, Donostia, Spain, 20-24th of November 2023.
- **Prof. P. Miskovsky**, Full Professor, P.J. Safarik University of Kosice, Slovak Republic, 1st-10th of December of 2023.
- **Prof. Jaime Gómez Rivas**, Technical University of Eindhoven, The Netherlands, 18-20th of December 2023.
- **Ms. Veronica Zuffi**, Università di Bologna, Italy, 15th July-31st December of 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / *MOLECULAR PHYSICS*

- **Dra. Samira Dalbouha**. Universidad Mohammed V de Rabat (Morocco). 8th June–20th September 2023.
- **Dr. Stéphane Colin**, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 31st of May 2023.
- **Dr. Marcos Rojas-Cárdenas**, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 31st of May 2023.
- **Slaven Bajic**, PhD student. Université Toulouse III - Paul Sabatier, 6th May–11th of June 2023.

CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

Invited Researchers Conferences

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

Prof. Leonardo Modesto.

SUSTech, Shenzhen, China.

Nonlocal quantum gravity: theory and implications.

12th January 2023.

Dr. Leslaw Rachwal.

Czech Technical University, Prague, Czech Republic.

UV-Finite and Higher-Derivative Gravitational Theories.

6th March 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / *MOLECULAR PHYSICS*

Dr. Stéphane Colin (Professor).

Institut Clément Ader. Toulouse, Francia.

Gas flows in fluidic microsystems: from theory to applications.

Part of the official program of IEM seminars.

31st May 2023.

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR
PHYSICS**

Prof. Mariano Campoy

Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona.

High Throughput Screening in Organic Solar Cells: Improving our fundamental understanding and the device efficiency.

9th March 2023.

**VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS
INTERNACIONALES - *Visits to Foreign Institutions***

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

Eduardo Garrido Bellido

- Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Pisa, Italy, 5th -11th of February 2023.

Gianluca Calcagni

- Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, 16th-24th of July 2023.

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

Álvaro Buendía Gallego.

- Department of Physics and Astronomy, University of Exeter, UK, May-July 2023.

Santiago Sánchez Cortés.

- Center for Interdisciplinary Biosciences, Technology and Innovation Park of P. J. Šafárik University in Košice (Slovakia), 4th of January-31st of March 2021, 27th November–1st December 2023.
- Group of Nanomaterials, Laboratory for Vascular Translational Science. Université de Paris 13, Paris (France). 13th – 28th of April 2023.
- Dipartimento di Scienze e Tecnologie Agro-Alimentari. Università degli Studi di Bologna (Italy), 13th – 19th of February, 7th -11th of June, 16th -22nd of November 2023.

Samuel Escrig López.

- Laboratory of High Energy Nuclear Physics - Cluster for Pioneering Research, RIKEN (Wako, Japan) International Program Associate (IPA) : 1st of October 2022-31st of March 2023.

Daniel Fernández Ruiz.

- ISOLDE, CERN, FPI Internship. 1st of October-1st of November 2023

Bruno Olaizola Mampaso.

- National Laboratory of Legnaro (Italy), participation in an experimento (Lnl22.101) 1st–9th of May 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José Luis Doménech Martínez.

- I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Germany, 3rd-17th of December 2023.

Vicente Timón Salinero.

- Laboratory of Thermodynamics and Molecular Modelisation (LTMM) at the University of Sciences and Technology Houari Boumediene (USTHB), Algiers, Algeria, 12th-26th of June 2023.

CAPÍTULO 5 – LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES

TEACHING, OUTREACH AND OTHER ACTIVITIES

DOCENCIA

Teaching

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Jesús Fernando Barbero González

- El Siglo de la Física – Bachelor program in Engineering (humanities course), National/Official program, Universidad Carlos III (Madrid) 11 hours imparted from 2nd of February to 9th of March, 2023.

María Luisa Senent Diez

- ATMOS2023 Greenhouse Gasses and Pollutants, Madrid (Spain), 27th-31st March 2023.

Eduardo Garrido Bellido

- Tutor Prácticas Externas Curriculares – Grado en CC. Físicas (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 13th February–12th May 2023 – 150 horas. Estudiante: Mario Rodríguez Gómez.

Marta García Olmos

- Física I – Grado en Matemáticas (National Official) – Universidad de Salamanca. 6th September 2023 – 13th December 2023 - 30 hours.

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

O. Tenglad, V. García Távora, MJG Borge, J. Briz, J. Diaz, A. Jungclaus, C. Rappold, S. Escrig López

- Técnicas Experimentales Avanzadas en Física Nuclear - MASTER Interuniversitario en Física Nuclear - IEM-CSIC – 23rd January – 3rd d February 2023.

Christophe Rappold

- Tutor Prácticas Externas Curriculares – Grado en CC. Físicas (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 27th February–5th May 2023 – 150 horas. Estudiante: David Calonge González.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

- Tutor Prácticas Externas Extracurriculares – Grado en CC. Químicas (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 16th January 2023 – 19th May 2023 – 216 horas. Estudiante: Marcos de Lucas Medina.
- Tutor Prácticas Externas Curriculares – Grado en CC. Físicas (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 13th February–12th May 2023 – 150 horas. Estudiante: Laura García Déniz.

Vicente Timón Salinero

- Tutor Prácticas Externas Extracurriculares – Grado en CC. Físicas (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 24th January 2023 – 31th March 2023 – 150 horas. Estudiante: Fernando Moreno Borrego.
- Tutor Prácticas Externas Extracurriculares – Máster Astrofísica (National Official) – Universidad Complutense de Madrid. 25th February 2023 – 31th March 2023 – 150 horas. Estudiante: Pablo León Gutiérrez.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Aurora Nogales Ruiz

- Tutora del Programa EIT Raw materials funded RIS Internship (María Mallo Álvarez).
4th of September 2023-4th of December 2023 – 400 hours.

Javier Ramos Díaz

- Tutor de Prácticas Curriculares (Alba Grandío Izquierdo) – Materiales – Grado – National Official – Universidad Rey Juan Carlos.
1st of February 2023-25th of April 2023 – 400 h
- Tutor de Trabajo Fin de Grado (Alba Grandío Izquierdo) – Materiales – Grado – National Official – Universidad Rey Juan Carlos.
1st of February 2023-10th of October 2023
- Tutor de Trabajo Fin de Máster (Emma Franco Mateos) – Materiales – Máster – National Official – Universidad Internacional Menéndez Pelayo.
3rd October 2022-21st June 2023
- Simulación Molecular - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
22th of February-1th of April 2023 – 14 hours

Juan Francisco Vega Borrego

- Tutor de Prácticas Curriculares (Jesús Reales Orgaz) – Materiales – Grado – National Official – Universidad de Alcalá de Henares.
13th of March 2023-31st of May 2023 – 400 h
- Tutor de Trabajo Fin de Grado (Alba Grandío Izquierdo) – Materiales – Grado – National Official – Universidad Rey Juan Carlos.
1st of February 2023-10th of October 2023
- Tutor de Trabajo Fin de Máster (Emma Franco Mateos) – Materiales – Máster - National Official – Universidad Internacional Menéndez Pelayo.
3rd October 2022-21st June 2023
- Reología (Profesor Responsable) - Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos – Internacional - Universidad Internacional Menéndez Pelayo - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
13th February-3th March 2023 – 12 hours.
- Tutor de Prácticas Externas Curriculares (Lola Aguilera Villegas) – Ingeniería Física - Grado – National Official – Universidad Carlos III de Madrid.
16th of October 2023-14th of February 2024.

CURSOS, CONFERENCIAS Y SEMINARIOS

Courses, Conferences and Seminars

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

José González Carmona

- El grafeno como laboratorio de materiales topológicos, XIX Curso de Iniciación a la Investigación, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 24th of March 2023.

Jesús Fernando Barbero González

- Quantum Gravity Seminar, Perimeter Institute (Waterloo, Canada), 20th of April, 2023, On the computation of Poisson brackets in field theories.
- Universidad Carlos III de Madrid, 5th of May, 2023. Ondas y gravedad.

Gianluca Calcagni

- Imminent test of quantum gravity with gravitational waves, Heidelberg U., Germany, 10th of January 2023.
- Fractional quantum gravity, IFT, Madrid, 2nd of February 2023.
- Gravedad cuántica, cosmología, ondas gravitacionales, XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 24th of March 2023.

Rafael Alejandro Molina Fernández

- Transporte Cuántico – XIX Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia, CSIC, Madrid, 24th March 2023.

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

Carlos Cabrillo García

- La física de la materia desordenada, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 22th-24th of March 2023.

Álvaro Buendía Gallego

- Minimizing effect of long-range interactions in topological protection of plasmonic arrays. Jornada del programa de doctorado de Física de la Materia condensada, Nanociencia y Biofísica (UAM). 30th of January 2023. Madrid, Spain.
- Controlando la luz en la nanoscala, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 23rd of March 2023.
- Strong coupling between molecules and topological edge states of plasmonic arrays of nanoparticles. IOPTICA Scientific Seminars 2023. 18th of December 2023. Madrid, Spain.

José Luis Pura Ruiz

- The emergence of Bound States in the Continuum in all-dielectric metasurfaces and their applications. IOPTICA Scientific Seminars 2023. 24th January 2023, Madrid, Spain.

Christophe Rappold

- Machine Learning en el programa de Física Nuclear en GSI-FAIR. *XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 22th-24th March 2023.

Bruno Olaizola Mampaso

- Experimentos de física nuclear *XIV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 22th-24th March 2023.

Samuel Escrig López

- “Experimento WASA@FRS: Estudio de hipernúcleos ligeros” part of the “Física Nuclear Aplicada II” of the “Máster Interuniversitario en Física Nuclear” for the Universidad Complutense de Madrid, 14th February 2023

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

- Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo. Conferencia a estudiantes de Bachillerato, Catálogo de Conferencias Científicas del CSIC dirigidas al Sistema Educativo de la Comunidad de Madrid, IES José Saramago Majadahonda (Madrid), 30th of January 2023.
- Espectroscopía: una potente herramienta para conocer el Universo. Conferencia a estudiantes de Bachillerato, Catálogo de Conferencias Científicas del CSIC dirigidas al Sistema Educativo de la Comunidad de Madrid, IES Profesor Máximo Trueba, Boadilla del Monte (Madrid), 19th of December 2023.
- Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 22nd – 24th of March 2023.

Guzmán Tejada Gala

- Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 22nd – 24th of March 2023
- Visit to the Laboratory of Molecular Fluid Dynamics, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 22nd – 24th of March 2023.

Belén Maté Naya

- Physical and spectroscopic properties of molecular ices—Winter School: Laboratory Astrophysics: tracking the evolution of cosmic matter towards molecular complexity, Observatoire de Paris (PSL), CNRS, Les Houches, 9th of February 2023.
- “Simulando hielos astrofísicos en el laboratorio.”, Webinar organized by Área Mujeres en Óptica y Fotónica de SEDOPTICA, 7th of February 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Mari Cruz García Gutiérrez

- El uso de Grandes Instalaciones Científicas en la investigación de la Materia Condensada Blanda, *XIX 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, 22nd – 24th of March 2023.

Víctor Luis Cruz Cañas

- Terapias contra el cáncer basadas en anticuerpos monoclonales: una mirada "in silico", *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular*, Madrid, 22nd March 2023.

Juan Francisco Vega Borrego

- Biofísica macromolecula: experimentos y simulació por ordenador, *XIX Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular*, Madrid, 22nd March 2023.
- Presentación del Grupo BIOPHYM en al Asamblea General de la Plataforma SUSPLAST, Madrid 21st November 2023.

Javier Ramos Díaz

- Optimización de aplicaciones computacionales orientadas a la investigación, Cursos del Gabinete de Formacion del CSIC, 28 h (10 horas impartidas), Madrid, 2nd – 6th October 2023.
- Presentación del Grupo BIOPHYM en al Asamblea General de la Plataforma SUSPLAST, Madrid 21st November 2023.

Patricia Martínez García

- The fear of periodic polymer surfaces to water, *XIX 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, 22nd – 24th of March 2023.

PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

Awards

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Guillermo Antonio Mena Marugán

- Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences* as Review Editor in Cosmology.
- Member of the Editorial Board of the journal *Universe*.
- External Member for the Quality Committee of the Doctorate Program in Physics of the Universidad Complutense de Madrid.

Jesús Fernando Barbero González

- President of the Sociedad Española de Gravitación y Relatividad (SEGRE).
- Associate Editor for the *Journal of Geometry and Mechanics* (American Institute of Mathematical Sciences).

María Luisa Senent Diez

- Member of the Scientific Advisory Committee of the International Conference International Symposium on Molecular Spectroscopy. Urbana-Champaign Illinois (USA).

Gianluca Calcagni

- Field Chief Editor of *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*.
- Chair of the LISA Membership Management Team.
- Member of the LISA Internal Networking Committee for Science.
- Member of the Consortium Constituent Council.

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

José A. Sánchez Gil

- 2023 Optica Fellow.
- Optica Optics Express Associate Editor.
- MDPI Nanomaterials Review Editor.

Santiago Sánchez Cortés

- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Journal of Raman Spectroscopy*.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Chemisensor* journal.
- Member of the Scientific Advisory Committee of the *Vibrational Spectroscopy* journal.

Sagrario Martínez Ramírez

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

Daniel Fernández Ruiz

- Prize 2nd best talk among young researchers in XXXVII Mazurian Lakes Conference on Physics, Piaski, (Poland), 3rd-9th September 2023
- Prize 2nd best talk among young researchers in ISOLDE Workshop and Users Meeting, CERN, Geneva, Switzerland, 29Nov – 1st of December

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

José M. Fernández Sánchez

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

Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga

- Member of the Scientific Advisory Committee of the Europhysics Conferences on Atomic and Molecular Processes in Ionized Gases (ESCAMPIG).

Belén Maté Naya

- Member of the Editorial Board of the Revista Española de Física de la Real Sociedad Española de Física, since February 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Mari Cruz García Gutiérrez

- Spanish Delegate of the European Synchrotron Radiation Facility Council, since September 2014.

Juan Francisco Vega Borrego

- Guest Editor of the Issue "In memoriam of Prof. Javier Martínez-Salazar". A Special issue of Polymer – Elsevier (ISSN: 0032-3861), 2023.
- Member of the Editorial Board of the journal Polymers, since 2020.

ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN *Outreach Activities and Material*

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Guillermo A. Mena Marugán

- Ondas gravitacionales.
Outreach conference.
E.T.S.I. Minas y Energía, Madrid.
26 th of June 2023.
- Series of online outreach seminars ‘‘Café con’’.
Collaboration with the Real Sociedad Económica Extremeña de Amigos del País in the organization of the following seminars in the series (and participation in one of them):
 - José M. Martín Senovilla, Universidad del País Vasco/EHU, El tiempo: realidad o ilusión, (https://www.youtube.com/watch?v=PG3E2_0vChk), Main Lecture Hall of the RSEEAP in Badajoz and online, 14th of June 2023.
 - Antxon Alberdi, Instituto de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Cumpliendo un sueño. Fotografiando agujeros negros (<https://www.youtube.com/watch?v=aQoBZsCtznU>), 19th of April 2023.Online seminars, recorded and available at <https://www.facebook.com/conoce.cafecon/>
<https://www.youtube.com/@rseeap/streams>

Jesús Fernando Barbero González

- Base 2, base 3,..., base n: curiosidades de los sistemas de numeración. Semana de la Ciencia en el IEM. Madrid 14th of November 2023.
- I.E.S. Margarita Salas (Majadahonda, Madrid), 16th of February, 2023, ¿Qué es la Relatividad?
- I.E.S. Margarita Salas (Majadahonda, Madrid), 16 th of February, 2023, Materiales asombrosos.

Jesús Fernando Barbero González y Rafael Alejandro Molina Fernández

- Del Cosmos al nano... y más allá. Escape room para estudiantes entre 14 y 16 años. IEM-CSIC, Madrid, 17th of November 2023.

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

Álvaro Buendía Gallego

Taller "Descubriendo la luz":

- Colegio Viña Virgen de Villarrubia de los Ojos, Ciudad Real (29th of March 2023)
- Semana de la Ciencia, Madrid (14th of November 2023)

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Angel L. González Valdenebro

“Una Historia de entrelazamiento” - Conferencia divulgativa

Semana de la Ciencia y la Innovación

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

14 de noviembre y 22 de diciembre de 2023.

Guzmán Tejada Gala, Vicente Timón Salinero, Ramón Peláez de Fuentes y Ángel González Valdenebro

Volamos y levitamos - Taller de experimentos caseros dirigidos a estudiantes de 5º y 6º de primaria y 1º de ESO – Semana de la Ciencia y la Innovación.

Colegio Salesianas Sagrado Corazón de Jesús. CEIP Navas de Tolosa, IES Gran Capitán, Colegio SEK-El Castillo, CP Pablo Picasso, IES Enrique Tierno Galvan, Colegio La Inmaculada Marillac, CP Breogan, IES Juan de la Cierva

Ámbito regional de la Comunidad de Madrid.

Entre el 1 de noviembre y 14 de diciembre de 2023.

Guzmán Tejada Gala, Belén Maté Naya y Vicente Timón Salinero

Del cosmos al nano y más allá - “Escape Room”

Semana de la Ciencia y la Innovación

Instituto de Estructura de la Materia CSIC, Madrid

17 de noviembre de 2023, como parte de Semana de la Ciencia y la Innovación.

Belén Maté Naya

Visita guiada al laboratorio de Hielos del Instituto de Estructura de la Materia, Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid. IEM-CSIC, 2023.

Vicente Timón Salinero

Locutor y presentador del programa semanal de ciencia Locuciencia en la emisora comunitaria Radio Almenara, 106.7 FM Madrid Norte.
(<https://radioalmenara.net/spip.php?rubrique117>)

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR *MACROMOLECULAR PHYSICS*

Tiberio Ezquerro Sanz

- Actor in “Cifras y Ciencias”. Scientific theater TeatrIEM:
 - 14th of January 2023. Residència d’investigadors. Barcelona.
 - 28th of January 2023. Centro Cultural Viñagrande. Alcorcón, Madrid
 - 19th of February 2023. Residencia de Estudiantes. Madrid
 - 13th of July 2023. Real Jardín Botánico. Madrid.
- Actor in “Ciencia y escena: Diez años de TeatrIem”. Scientific theater TeatrIEM:
 - 8th, 10th and 11th of November 2023. Museo nacional de Ciencias Naturales in the framework of Semana de la Ciencia.

Aurora Nogales Ruiz

- Entrevista en radio
 - Programa La Estación Azul de los Niños (LEAN), Radio 5, Radio Nacional de España
 - Fecha 11/02/2023. (<https://www.rtve.es/play/audios/la-estacion-azul-de-los-ninos/estacion-azul-ninos-especial-lean-dia-mujer-nina-ciencia/6806774/>)
- Coloquio y encuesta a alumnos en centros de educación secundaria:
 - Colegio las Rosas (6/02/2023)
 - IES Palomeras (14/02/2023)
 - CEIPSO Navas del Rey (15/02/2023)
- Celebración del día Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia en el Museo de Ciencia y Tecnología (MUNCYT).
 - Conferencia: ‘Atrevete a ser científica’

- Scape Room. Del Cosmos al Nano y Mas Allá (enmarcado en la semana de la ciencia del Instituto de Estructura de la Materia)

- Comisión organizadora Coloquios Curie. Coloquios Organizados durante 2023:
 - Life and Fate of Energy Conversion Electrocatalysts Beatriz Roldán Cuenya Department of Interface Science, Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Berlin, Germany (19/12/2023)
 - Para que sirve una mosca. Ginés Morata Pérez Profesor de Investigación en el Centro de Biología Molecular Severo Ochoa y miembro de la Royal Society del Reino Unido y de la Academia Nacional de Ciencias de EE UU (6/11/2023)
 - Making Science Work for Refugees and Refugees Work for Science. Anthony J. Ryan Profesor de Física Química de la Universidad de Sheffield y Director Fundador del Grantham Centre for Sustainable Futures. 23/5/2023
 - Sincrotrón ALBA, presente y futuro. Caterina Biscari Directora del Sincrotrón ALBA. 27/4/2023.
 - El Traje Nuevo de la Inteligencia Artificial. Ramon López de Mántaras Profesor emérito del Instituto de Investigación en Inteligencia Artificial. 3/3/2023

Mari Cruz García Gutiérrez

- Actress and assistant director in “Cifras y Ciencias”. Scientific theater TeatrIEM:
 - 14th of January 2023. Residència d’investigadors. Barcelona.
 - 28th of January 2023. Centro Cultural Viñagrande. Alcorcón, Madrid
 - 19th of February 2023. Residencia de Estudiantes. Madrid
 - 13th of July 2023. Real Jardín Botánico. Madrid.
- Actress in “Ciencia y escena: Diez años de TeatrIem”. Scientific theater TeatrIEM:
 - 8th, 10th and 11th of November 2023. Museo nacional de Ciencias Naturales in the framework of Semana de la Ciencia.
- Member of the jury of the III TeatrIEM contest of short theatrical texts with a scientific subject.
- Organizer and moderator of the colloquium “Encuentro de teatro y Ciencia” (21/06/2023).
- Organizer of the IV TeatrIEM contest of short theatrical texts with a scientific subject.

Dr. Javier Ramos Díaz

- Proyecto de docencia en colaboración con la UAH “Visualiza la simetría”
Página web: <https://visualiza-simetria.web.uah.es/> - 2023

Juan Francisco Vega Borrego

- Press release and interview American Institute of Physics (AIP) – by Wendy Beatty
Breaking into tears with microrheology to design custom eye drops
Página web: <https://publishing.aip.org/publications/latest-content/breaking-into-tears-with-microrheology-to-design-custom-eye-drops/> - 11th July 2023

- Press release – by CSIC comunicación
Un estudio abre el camino al diseño de colirios con una eficacia similar a la de las lágrimas naturales
Página web: <https://www.csic.es/es/actualidad-del-csic/un-estudio-abre-el-camino-al-diseno-de-colirios-con-una-eficacia-similar-la-de>
21st July 2023
- Press release and interview, Institute of Physics (IOP) – by Isabelle Dumé
Brownian motion study shows real tears are more viscous than artificial ones
Página web: <https://physicsworld.com/a/brownian-motion-study-shows-real-tears-are-more-viscous-than-artificial-ones/>
13th August 2023
- Interview in “Por tres razones” – Radio Nacional de España (RNE)
Podcast: <https://www.rtve.es/play/audios/por-tres-razones/cirrosis-ojo-seco-comprar-habitaciones-okupacion-170823/6952928/>
17th August 2023

TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Transfer of Technology

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

Reuniones de transferencia de tecnología:

Meeting attendees: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Videoconference.

Date: During all the 2023 year, once a week.

Miembros de comités científicos asesores:

Member: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Regulaxis SAS Company.**

Place: Technological Park in Paris, France.

Date: 2023

Member: Santiago Sánchez Cortés.

Collaboration: **Saftra Photonics Ltd.**

Place: Technological Innovation Park in Kosice (Slovakia).

Date: 2023

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / *MACROMOLECULAR PHYSICS*

Reuniones de transferencia de tecnología:

Título de la reunión: PE characterization topics

Meeting attendees: Juan Francisco Vega Borrego, Andrés Cardil, Armelle Sigwald and Olivier Lhost

Collaboration: Total RC/R&D Polymers

Place: Madrid (Spain) and Seneffe (Belgium) - Online

Dates: 14th November 2023

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto:

Speaker: Juan Francisco Vega Borrrego and Andrés Cardil.

Title: Molecular characterization by elongation rheological modelling

Colaboration: Total RC/R&D Polymers.

Place: Madrid (Spain) and Seneffe (Belgium) - Online.

Dates: 14th of November 2023.

Informes de transferencia tecnológica:

Juan Francisco Vega Borrrego and Andrés Cardil.

Molecular characterization by elongation rheological modelling

Total SE (March, June and November 2023).

UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES

Associated Units and Other Activities

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

Unidades Asociadas / *Associated Units:*

- ***Group of Field Theory and Statistical Physics. Instituto Universitario Gregorio Millán Barbany***, University of Carlos III of Madrid.
Responsible: Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor.
Members of the IEM participating in this Associated Unit:
Jesús Fernando Barbero González (responsible) and José González Carmona.

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

Responsible: Miguel Carvajal Zaera.

Members of the IEM participating in this Associated Unit:

María Luisa Senent Diez (responsible), J. Dukelsky, J.M. Fernández, G. Tejada, M.J. García Borge and O. Tengblad.

Objetivos: Caracterización espectroscópica de especies moleculares no-rígidas y de gases de efecto invernadero empleando métodos ab initio altamente correlacionados, técnicas teóricas y experimentales para la medida y análisis de espectros rovibracionales y rotacionales y espectroscopia Raman. Y estudios de reacciones nucleares próximas a la barrera coulombiana y de interés astrofísico.

María Luisa Senent Diez

- Member participating in Associated Unit *Department of Physical Chemistry I*, University Complutense of Madrid.

Otras actividades / Other activities

Gianluca Calcagni

- Inauguration of the CFMAC astronomical observatory “**Colina de los Chopos**” (15th of November 2023) with CSIC president Eloisa del Pino. Preparation of the observatory for popularizing activities for the public (talks, observations).

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

Unidades Asociadas / Associated Units:

- **Centre for Micro Analysis of Materials (CMAM)**, UAM.

Responsible: Gastón García.

Members of the IEM participating in this Associated Unit:

María José García Borge (responsible), O. Tengblad, A. Jungclaus; B. Olaizola and C. Rappold.

Objetivo: Crear un grupo interdisciplinar de trabajo entre el grupo de Física Nuclear experimental, FNEXP y el Centro de Microanálisis de Materiales CMAM, institucionalizando la larga colaboración existente entre ambos equipos mediante el intercambio de conocimientos y de colaboración en proyectos y actividades en física nuclear.

M^a José Gacía Borge and Olof Tengblad

- Members participating in Associated Unit *group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

Otras actividades / Other activities:

- T. R. Saito y **Christophe Rappold** IPs for the Memorandum of Understanding / Protocolo General de Actuación between IEM-CSIC and HENP-RIKEN for research activities on the study of hypermatter from 1 August 2022 to July 31st 2027.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

Unidades Asociadas / Associated Units:

- **Department of Physical Chemistry I**, University Complutense of Madrid.
Comprising IEM-CSIC, IQF-CSIC, IFF-CSIC and Department Química Física I-UCM.
Responsible: Javier Aoiz Molerés.
Members of the IEM participating in this Associated Unit:
Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga (responsible), J.L. Doménech Martínez, J.M. Fernández Sánchez, M.L. Senent Diez, I. Tanarro Onrubia, B. Maté Naya and J. Ortigoso Martínez.

José M. Fernández Sánchez and Guzmán Tejeda Gala

- Members participating in Associated Unit *Group in Molecular, Atomic and Nuclear Physics (GIFMAN)*, University of Huelva.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Otras actividades / Other activities

- **Física de Sistemas Crecidos con Baja Dimensionalidad**, Universidad Autónoma de Madrid.
Responsible: Jesús Álvarez Alonso.
Members of the IEM participating in this Associated Unit:
María José Capitán Aranda (responsible).
- **Nanoestructura de la Materia (NANOesMAT)**, UNED.
Responsible: Óscar Gálvez.
Comprising groups SOFTMATPOL (IEM-CSIC), LANAMAP (IQF Blas Cabrera) and Raman and Infrared Spectroscopy and Modeling (UNED).
Members of the IEM participating in this Associated Unit:
Tiberio Ezquerro Sanz (responsible), M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales and G. Santoro.
Objective: Share experience and to carry out a coordinated effort around research in soft and polymeric condensed matter.

CAPÍTULO 6 – PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 6 – PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC PRODUCTION

PUBLICACIONES EN REVISTAS Y PROCEEDINGS ISI *ISI Publications*

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

1. P. Auclair, ..., G. Calcagni et al. [LISA Cosmology Working Group].
Cosmology with the Laser Interferometer Space Antenna.
Living Reviews in Relativity 26, 5 (2023).
2. G. Calcagni, B.L. Giacchini, L. Modesto, T. de Paula Netto, and L. Rachwal.
Renormalizability of nonlocal quantum gravity coupled to matter.
Journal of High Energy Physics 09 (2023) 034.
3. G. Calcagni and L. Rachwal.
Ultraviolet-complete quantum field theories with fractional operators.
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics 09 (2023) 003.
4. A. L. Corps, P. Pérez-Fernández, and A. Relaño.
Relaxation time as a control parameter for exploring dynamical phase diagrams.
Physical Review B 108, 174305 (2023).
5. A. L. Corps and A. Relaño.
Theory of dynamical phase transitions in quantum systems with symmetry-breaking eigenstates.
Physical Review Letters 1030, 100402 (2023).
6. A. L. Corps, P Stránský, and P. Cejnar.
Mechanism of dynamical phase transitions: The complex-time survival amplitude.
Physical Review B 107, 094307 (2023).
7. J. Cortez, B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, A. Torres-Caballeros and J.M. Velhinho.
Fock Quantization of a Klein-Gordon Field in the Interior Geometry of a Nonrotating Black Hole.
Mathematics 11, 3922 (2023).

8. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán and J. Yébana Carrilero.
Effects of the Inflaton Potential on the Primordial Power Spectrum in Loop Quantum Cosmology Scenarios.
Physical Review D 108, 083521 (2023).
9. B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán and A. Mínguez-Sánchez.
Extended Phase Space Quantization of a Black Hole Interior Model in Loop Quantum Cosmology.
Physical Review D 108, 106001 (2023).
10. A. Garros, D.R. Alcoba, P. Capuzzi, L. Lain, A. Torre, O.B. Oña, and J. Dukelsky.
Determination of electronic excitation energies within the doubly occupied configuration interaction space by means of the Hermitian operator method.
Journal of Chemical Physics 159, 124107 (2023).
11. E. Garrido, A.S. Jensen, H.O.U. Fynbo, and K. Riisager.
Three-body calculations of β decay applied to ${}^7\text{Li}$.
Physical Review C 107, 014003 (2023).
12. E. Garrido and A.S. Jensen.
Tuning of Efimov states in non-integer dimensions.
European Physical Journal D 77, 46 (2023).
13. J. González and T. Stauber.
Ising superconductivity induced from spin-selective valley symmetry breaking in twisted trilayer graphene.
Nature Communications 14, 2746 (2023).
14. M. Hita-Pérez, L. Muñoz, R.A. Molina.
Missing levels in intermediate spectra.
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 56, 505702 (2023).
15. B. Kerkeni, V. Gámez, G. Ouerfelli, M.L. Senent and N. Feautrier
Theoretical investigations of propyl-cyanide formation in gas phase and on ice mantles.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 552, 5254 (2023).
16. Labajos, M.J.; Calcagni, G.; Pellón, R.
Mutual facilitation between activity-based anorexia and schedule-induced polydipsia in rats.
Learning and Behavior 2023 Dec;51(4):521
<https://doi.org/10.3758/s13420-022-00560-2>
17. Z. Liu, F. Gao, G.P. Chen, T.M. Henderson, J. Dukelsky, and G.E. Scuseria.
Exploring spin antisymmetrized geminal power Ansatzes for strongly correlated spin systems.
Physical Review B 108, 085136 (2023).

18. J. Liu, L. Modesto, and G. Calcagni.
Quantum field theory with ghost pairs.
Journal of High Energy Physics 02 (2023) 140.

19. M. A. Quiroz-Juarez, A.L. Corps, R.A. Molina, A. Relaño, J.L. Aragón, R. de J. León-Montiel, and J.G. Hirsch.
Experimental observation of phase transitions of a deformed Dicke model using a reconfigurable, bi-parametric electronic platform.
European Physical Journal Plus 138, 775 (2023).

20. P. Sarriguren.
Quadrupole deformation signatures in elastic electron scattering from oriented odd-A nuclei.
Physics Letters B 837, 137664 (2023).

21. T. Stauber, M. Wackerl, P. Wenk, D. Margetis, J. González, G. Gómez-Santos, and J. Schliemann.
Neutral magic-angle bilayer graphene: Condon instability and chiral resonances.
Small Science 3, 2200080 (2023).

22. A. Vitéz-Sveiczler, A. Algora, G.G. Kiss, B. Rubio, A. I. Morales, P. Sarriguren, G. de Angelis, F. Recchia, S. Nishimura, J. Agramunt, V. Guadilla, *et al.*
The beta-decay of ^{71}Kr : precise measurement of the half-life.
EPJ Web of Conferences 290, 02021 (2023).

23. J.T. Zhang, P. Ma, Y. Huang, X.L. Tu, P. Sarriguren, Z.P. Li, Y. Kuang, W. Horiuchi, T. Inakura, L. Xayavong, Y. Sun, K. Kaneko, X.Q. Liu, K. Yue, C.J. Shao, Q. Zeng, B. Mei, P. Egelhof, Yu. A. Litvinov, M. Wang, Y.H. Zhang, X.H. Zhou, and Z.Y. Sun.
Matter radius of ^{78}Kr from proton elastic scattering at 153 MeV.
Physical Review C 108, 014614 (2023).

**PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS
IN COMMON WITH THE ENVYMED DEPARTMENT**

24. Z.Y. Xu, M. Madurga, R. Grzywacz, T.T. King, A. Algora, A.N. Andreyev, J. Benito, T. Berry, M.J.G. Borge, C. Costache, H. De Witte, A. Fijalkowska, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, A. Gottardo, C. Halverson, L.J. Harkness-Brennan, J. Heideman, M. Huyse, A. Illana, Ł. Janiak, D.S. Judson, A. Korgul, T. Kurtukian-Nieto, I. Lazarus, R. Lică, R. Lozeva, N. Marginean, R. Marginean, C. Mazzocchi, C. Mihai, R.E. Mihai, A.I. Morales, R.D. Page, J. Pakarinen, M. Piersa-Siłkowska, Zs. Podolyák, P. Sarriguren, M. Singh, Ch. Sotty, M. Stepaniuk, O. Tengblad, A. Turturica, P. Van Duppen, V. Vedia, S. Viñals, N. Warr, R. Yokoyama, and C.X. Yuan.
 ^{133}In : A Rosetta Stone for Decays of r -Process Nuclei.
Physical Review Letters 131, 022501 (2023).

25. Z.Y. Xu, M. Madurga, R. Grzywacz, T.T. King, A. Algora, A.N. Andreyev, J. Benito, T. Berry, M.J.G. Borge, C. Costache, H. De Witte, A. Fijalkowska, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, A. Gottardo, C. Halverson, L.J. Harkness-Brennan, J. Heideman, M. Huyse, A. Illana, Ł. Janiak, D.S. Judson, A. Korgul, T. Kurtukian-Nieto, I. Lazarus, R. Lică, R. Lozeva, N. Marginean, R. Marginean, C. Mazzocchi, C. Mihai, R.E. Mihai, A.I. Morales, R.D. Page, J. Pakarinen, M. Piersa-Siłkowska, Zs. Podolyák, P. Sarriguren, M. Singh, Ch. Sotty, M. Stepaniuk, O. Tengblad, A. Turturica, P. Van Duppen, V. Vedia, S. Viñals, N. Warr, R. Yokoyama, and C.X. Yuan.
 β -delayed neutron spectroscopy of ^{133}In .
Physical Review C 108, 014314 (2023).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR /
PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

26. C. Adjal, V. Timón, N. Guechtouli, R. Bousseffi, D. Hammoutene, and M.L. Senent.
The role of water in the adsorption of Nitro-organics pollutants on Activated Carbon.
The Journal of Physical Chemistry A 127, p.8146 (2023).

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

1. O. Arroyo-Gascón, R. Fernández-Perea, E. Suárez Morell, C. Cabrillo, L. Chico.
Universality of moiré physics in collapsed chiral carbon nanotubes.
Carbon 205, p. 394 (2023).
2. A. M. Berghuis, G. W. Castellanos, S. Murai, Jose Luis Pura, D. R. Abujetas, E. van Heijst, M. Ramezani, José A. Sánchez-Gil, J. Gómez Rivas.
Room Temperature Exciton-Polariton Condensation in Silicon Metasurfaces Emerging from Bound States in the Continuum.
Nano Letters 23, 5603–5609 (2023).
3. Á Buendía, J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini.
Exploiting oriented field projectors to open topological gaps in plasmonic nanoparticle arrays.
ACS Photonics 10, 464-474 (2023).
4. T.M. Casimiro, S. Martínez-Ramírez, A. Crespo-Solana, M. San Claudio, I. Castro.
The “San Giacomo di Galizia” Warship Galleon (1597)—Building Narratives through an Archaeological and Historical Reading of the Ribadeo I Shipwreck.
Heritage 6(2), 1732-1753 (2023).
<https://doi.org/10.3390/heritage6020092>
5. F. Celis, A. Aracena, M. García, R. Segura del Río, S. Sanchez-Cortes, P. Leyton.
Plasmon Chemistry on Ag Nanostars: Experimental and Theoretical Raman/SERS Study of the Pesticide Thiacloprid Bond Cleavage by the Plasmon Deactivation Effect.

- ACS Omega. 8, 22887–22898 (2023).
6. Chen, S.; Browne, F.; Doornenbal, P.; Lee, J.; Obertelli, A.; Tsunoda, Y.; Otsuka, T.; Chazono, Y.; Hagen, G.; Holt, J.D.; Jansen, G.R.; Ogata, K.; Shimizu, N.; Utsuno, Y.; Yoshida, K.; Achouri, N.L.; Baba, H.; Calvet, D.; Château, F.; Chiga, N.; Corsi, A.; Cortés, M.L.; Delbart, A.; Gheller, J.M.; Giganon, A.; Gillibert, A.; Hilaire, C.; Isobe, T.; Kobayashi, T.; Kubota, Y.; Lapoux, V.; Liu, H.N.; Motobayashi, T.; Murray, I.; Otsu, H.; Panin, V.; Paul, N.; Rodriguez, W.; Sakurai, H.; Sasano, M.; Steppenbeck, D.; Stuhl, L.; Sun, Y.L.; Togano, Y.; Uesaka, T.; Wimmer, K.; Yoneda, K.; Aktas, O.; Aumann, T.; Vaquero, V.
Level structures of $^{56,58}\text{Ca}$ cast doubt on a doubly magic ^{60}Ca .
Physics Letters B 843, 761-764 (2023).
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269323003593>
 7. Clément, E.; Lemasson, A.; Rejmund, M.; Jacquot, B.; Ralet, D.; Michelagnoli, C.; Barrientos, D.; Bednarczyk, P.; Benzoni, G.; Boston, A.J.; Bracco, A.; Cederwall, B.; Ciemala, M.; Collado, J.; Crespi, F.; Domingo-Pardo, C.; Dudouet, J.; Eberth, H.J.; De France, G.; Gadea, A.; Gonzalez, V.; Gottardo, A.; Harkness, L.; Hess, H.; Jungclaus, A., et al.
Spectroscopic quadrupole moments in Xe 124.
Physical Review C 107, 012023-497 (2023).
<https://digital.csic.es/handle/10261/306186>
 8. Cortina Gil, D.; Borge, M.; Moro, A.
Direct Reactions with Exotic Beams in Santiago de Compostela, Spain: DREB2022.
Nuclear Physics News 33, 28-29 (2023).
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10619127.2023.2168917>
 9. Das, P.; Datta, U.; Chakraborty, S.; Rahaman, A.; Tengblad, O.; Agrawal, B.K.; Becerril, A.; Cederkall, J.; Dey, J.; Gottberg, A.; Imam, S.M.A.; Kowalska, M.; Kurcewicz, J.; Lund, M.; Mandal, S.; Madurga, M.; Marginean, N.; Marginean, R.; Mihai, C.; Marroquin, I.; Nacher, E.; Negret, A.; Pascu, S.; Perea, A., et al.
Exotic decay of ^{115}Cs .
Physical Review C 108, 024305 – 13 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.064304>
 10. Díaz-Ovejas, J.; Martel, I.; Dell'Aquila, D.; Acosta, L.; Aguado, J.L.; de Angelis, G.; Borge, M.J.G.; Briz, J.A.; Chbihi, A.; Colucci, G.; Díaz-Martín, C.; Figuera, P.; Galaviz, D.; García-Ramos, C.; Gómez-Galán, J.A.; Gonzales, C.A.; Goyal, N.; Keeley, N.; Kemper, K.W.; Kurtukian Nieto, T.; Malenica, D.J.; Mazzocco, M.; Nurkić, D.; Orduz, A.K.; Ortiz, A.; Palada, L.; Parascandolo, C.; Di Pietro, A.; Rodriguez, A.M.; Rusek, K.; Salguero, F.; Sánchez-Benítez, A.M.; Sánchez-Raya, M.; Sánchez-Segovia, J.; Soić, N.; Soramel, F.; Stanoiu, M.; Tengblad, O.; Vukman, N.; Xarepe, M.
Suppression of Coulomb-nuclear interference in the near-barrier elastic scattering of ^{17}Ne from ^{208}Pb .
Physics Letters B 843, 01001-1519 (2023).
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269323003416>

11. Ekawa, H.; Dou, W.; Gao, Y.; He, Y.; Kasagi, A.; Liu, E.; Muneem, A.; Nakagawa, M.; Rappold, C.; Saito, N.; Saito, T.R.; Taki, M.; Tanaka, *et al.*
Development of machine learning analyses with graph neural network for the WASA-FRS experiment
European Physical Journal A 59, 012208 (2023).
<https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-023-01016-5>

12. D. Fernandez Ruiz; S. Viñals; O. Tengblad; M.J.G. Borge; H.O.U. Fynbo, K.; Riisager; E. Náchér.
R-Matrix study of the $+\beta$ decay of $8B$ to the highly excited states of $8Be$.
EPJ Web of Conferences 290 (2023) EuNPC-Proceedings 02008
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202329002008>

13. D. Fernandez Ruiz; O. Tengblad; M.J.G. Borge; H.O.U. Fynbo; Riisager
Reaction studies with neutron-rich light nuclei at the upgraded SEC Device: Exploring the excited structure of $11Li$.
EPJ Web of Conferences 290 (2023) EuNPC-Proceedings 02010.
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202329002010>

14. Fougères, C.; de Oliveira Santos, F.; José, J.; Michelagnoli, C.; Clément, E.; Kim, Y.H.; Lemasson, A.; Guimarães, V.; Barrientos, D.; Bemmerer, D.; Benzoni, G.; Boston, A.J.; Böttger, R.; Boulay, F.; Bracco, A.; Celikovic, I.; Cederwall, B.; Ciemala, M.; Delafosse, C.; Domingo-Pardo, C.; Dudouet, J.; Eberth, J.; Fülöp, Z.; González, V.; Gottardo, A.; Goupil, J.; Hess, H.; Jungclaus, *et al.*
Search for ^{22}Na in novae supported by a novel method for measuring femtosecond nuclear lifetimes.
Nature Communications 14, 00045 – 57 (2023).
<https://www.nature.com/articles/s41467-023-40121-3>

15. Gjestvang, D.; Wilson, J. N.; Al-Adili, A.; Siem, S.; Gao, Z.; Randrup, J.; Thisse, D.; Lebois, M.; Jovancevic, N.; Canavan, R.; Rudigier, M.; Etasse, D.; Gerst, R. -b.; Adamska, E.; Adsley, P.; Algora, A.; Belvedere, C.; Benito, J.; Benzoni, G.; Blazhev, A.; Boso, A.; Bottoni, S.; Bunce, M.; Chakma, R.; Cieplicka-Orynczak, N.; Courtin, S.; Cortes, M. L.; Davies, P.; Delafosse, C.; Fallot, M.; Fornal, B.; Fraile, L.; Gottardo, A.; Guadilla, V.; Hafner, G.; Hauschild, K.; Heine, M.; Henrich, C.; Homm, I.; Ibrahim, F.; Iskra, L. W.; Ivanov, P.; Jazrawi, S.; Korgul, A.; Koseoglou, P.; Kroll, T.; Kurtukian-Nieto *et al.*
Examination of how properties of a fissioning system impact isomeric yield ratios of the fragments.
Physical Review C 108, 024305–13 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.064602>

16. Guardo, G.L.; Petruse, T.; Lattuada, D.; La Cognata, M.; Balabanski, D.L.; Açiksöz, E.; Acosta, L.; Capponi, L.; Carbone, D.; Cherubini, S.; Choudhury, D.; D'Agata, G.; Di Pietro, A.; Figuera, P.; Gulino, M.; Kilik, A.I.; La Commara, M.; Lamia, L.; Matei, C.; Palmerini, S.; Pizzone, R.G.; Rapisarda, G.G.; Romano, S.; Sergi, M.L.; Söderström, P.A.; Spartà, R.; Tumino, A.; Viñals, S.
Direct measurement of the $^{19}F(p, a)^{16}O$ reaction at $E_{cm} = 0.4$ and 0.9 MeV using the LHASA detector array.
European Physical Journal A 59, 012208–792 (2023).
<https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-023-00957-1>

17. Heideman, J.; Grzywacz, R.; Xu, Z.Y.; Madurga, M.; Escher, J.E.; Kawano, T.; Algora, A.; Andreyev, A.N.; Benito, J.; Berry, T.; Borge, M.J.G.; Costache, C.; De Witte, H.; Fijalkowska, A.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Gottardo, A.; Halverson, C.; Harkness-Brennan, L.J.; Illana, A.; Janiak,; Judson, D.S.; King, T.T.; Korgul, A.; Kurtukian-Nieto, T.; Lazarus, I.; Lic \check{z} , R.; Lozeva, R.; Marginean, N.; Marginean, R.; Mazzocchi, C.; Mihai, C.; Mihai, R.E.; Morales, A.I.; Page, R.D.; Pakarinen, J.; Piersa-Si \check{c} kowska, M.; Podolyák, Z.; Singh, M.; Sotty, C.; Stepaniuk, M.; Tengblad, O.; Turturica, A.; Van Duppen, P.; Vedia, V.; Viñals, S.; Warr, N.; Yokoyama, R.; Yuan, C.X.
Evidence of nonstatistical neutron emission following β decay near doubly magic Sn 132.
Physical Review C 108, 4–13 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.024311>
18. B. Hernández, S. Sánchez-Cortés, M. Ghomi.
Energetic, conformational and vibrational features of the tripeptide (Gly) $_3$. Data from MP2 and DFT calculations.
Computational and Theoretical Chemistry 1220, 113989 (2023).
19. P. Holm, S. Ihanola, V. Bogdanoff, K. Peräjärvi, P. Dendooven, O. Tengblad, M. Muikku.
Novel environmental monitoring detector for discriminating fallout and airborne radioactivity.
Scientific Reports 13, 520–524 (2023).
<https://www.nature.com/articles/s41598-023-48730-0>
20. Illana, A.; Zieliska, M.; Huyse, M.; Rapisarda, E.; Van Duppen, P.; Wrzosek-Lipska, K.; Lenzi, S.M.; Nowacki, F.; Dao, D.D.; Otsuka, T.; Tsunoda, Y.; Arnswald, K.; Borge, M.J.G.; Cederkäll, J et al.
Coulomb excitation of Zn 74,76.
Physical Review C 108, 3–9 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.044305>
21. Kasagi, A.; Dou, W.; Drozd, V.; Ekawa, H.; Escrig, S.; Gao, Y.; He, Y.; Liu, E.; Muneem, A.; Nakagawa, M.; Nakazawa, K.; Rappold, C.; Saito, N.; Saito, T.R.; Sugimoto, S.; Taki, M.; Tanaka, Y.K.; Yanai, A.; Yoshida, J.; Yoshimoto, M.; Wang.
Hypernuclear event detection in the nuclear emulsion with Monte Carlo simulation and machine learning.
NIM A 1056, 443271-4432711
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900223006538>
22. Martel, I.; Acosta, L.; Aguado, J.L.; Assie, M.; Al-Aqeel, M.A.M.; Ballarino, A.; Barna, D.; Berjillos, R.; Bonora, M.; Bontoiu, C.; Borge, M.J.G.; Briz, J.A.; Bustinduy, I.; Bottura, L.; Catalina-Medina, L.; Catford, W.; Cederkäll, J.; Davinson, T.; de Angelis, G.; Devred, A.; Díaz-Martín, C.; Ekelöf, T.; Felice, H.; Fynbo, H.; Foussat, A.P.; Florin, R.; Freeman, S.J.; Gaffney, L.; García-Ramos, C.; Gentini, L.; Gonzalez-Cordero, C.A.; Guazzoni, C.; Haziot, A.; Heinz, A.; Jimenez, J.M.; Johnston, K.; Jonson, B.; Kirby, G.; Kirby, O.; Kurtukian-Nieto, T.; Labiche, M.; Liebsch, M.; Losasso, M.; Laird, A.; Muñoz, J.L.; Nara Singh, B.S.; Neyens, G.;

- Napiorkowski, P.J.; O'Donnell, D.; Resta-López, J.; Salguero-Andújar, F.; Sánchez-Segovia, J.; Sánchez-Benítez, A.M.; Tengblad, O.
An innovative Superconducting Recoil Separator for HIE-ISOLDE
 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 541, 176-179 (2023).
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X23002574>
23. A. N. Nerio; J. A. Briz; M. J. G. Borge; E. Nácher; O. Tengblad; Á. Perea; V. G. Távora.
Evaluation of water equivalent thicknesses using the IEM-CSIC scanner prototype.
 EuNPC 2022EuNPC-Proceedings
 EPJ Web of Conferences 290, 08004 (2023).
 DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202329008004>
24. Pasqualato, G; Ansari, S; Heines, JS; Modamio, V; Görgen, A; Korten, W; Ljungvall, J; Clément, E; Dudouet, J; Lemasson, A; Rodríguez, TR; Allmond, JM; Arici, T; Beckmann, KS; Bruce, ..., Jungclaus, A; et al.
Shape evolution in even-mass 98 - 104 Zr isotopes via lifetime measurements using the gamma-gamma-coincidence technique.
 European Physical Journal A 59, 441–446 (2023).
<https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-023-01172-8>
25. F. Puliga, V. Zuffi, D. Baldo, D. Cavatorta, A. Zambonelli, O. Francioso, S. Sánchez-Cortés.
Cladosporium cladosporioides (strain Clc/1): a candidate for low-density polyethylene degradation.
 Chem. Biol. Technol. Agric. 10, 1-11 (2023).
26. J.L. Pura, J.R. Deop-Ruano, D.R. Abujetas, V. Giannini, A. Manjavacas, J.A. Sánchez-Gil.
Tunable bound states in the continuum in active metasurfaces of graphene disk dimers.
 Nanophotonics 12, 4453-4460 (2023).
27. Jose Luis Pura.
Optical and Electrical Properties of Low-Dimensional Crystalline Materials: A Review.
 Crystals 13, 108 (2023).
28. J. L. Pura, C. Salvo-Comino, C. García-Cabezón, M. L. Rodríguez-Méndez.
Concurrent study of the electrochemical response and the surface alterations of silver nanowire modified electrodes by means of EC-AFM. The role of electrode/nanomaterial interaction.
 Surfaces and Interfaces 38, 102792 (2023).
29. C. Rappold, P. Achenbach, H. Alibrahim Alfaki, F. Amjad, M. Armstrong, K.-H. Behr, J. Benlliure, Z. Brencic, T. Dickel, V. Drozd, S. Dubey, H. Ekawa, S. Escrig, M. Feijoo-Fontán, H. Fujioka, Y. Gao, H. Geissel, F. Goldenbaum, A. Graña González, E. Haettner, M.N. Harakeh, Y. He, H. Heggen, C. Hornung, N. Hubbard, K. Itahashi, M. Iwasaki, N. Kalantar-Nayestanaki, A. Kasagi, M. Kavatsyuk, E. Kazantseva, A. Khreptak, B. Kindler, R. Knoebel, H. Kollmus, D. Kostyleva, S. Kraft-Bermuth, N. Kurz, E. Liu, B. Lommel, V. Metag, S. Minami, D.J. Morrissey,

- P. Moskal, I. Mukha, A. Muneem, M. Nakagawa, K. Nakazawa, C. Nociforo, H.J. Ong, S. Pietri, J. Pochodzalla, S. Purushothaman, E. Rocco, J.L. Rodríguez-Sánchez, P. Roy, R. Ruber, T.R. Saito, S. Schadmand, C. Scheidenberger, P. Schwarz, R. Sekiya, V. Serdyuk, M. Skurzok, B. Streicher, K. Suzuki, B. Szczepanczyk, Y.K. Tanaka, X. Tang, N. Tortorelli, M. Vencelj, H. Wang, T. Weber, H. Weick, M. Will, K. Wimmer, A. Yamamoto, A. Yanai, J. Yoshida, J. Zhao and WASA-FRS/Super-FRS Experiment Collaboration.
Study of light hypernuclei in Europe: The hypertriton and $nn\Lambda$ puzzles.
EPJ Web of Conference 290, 09007 (2023).
30. Rocchini, M; Garrett, PE; Zielinska, M; Lenzi, SM; Dao, DD; Nowacki, F; Bildstein, V; MacLean, AD; Olaizola, B; et al.
First Evidence of Axial Shape Asymmetry and Configuration Coexistence in Zn 74: Suggestion for a Northern Extension of the $N = 40$ Island of Inversion.
Physical Review Letters 130, 122502 (2023).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.122502>
31. Saito, T.R.; Achenbach, P.; Alfaki, H.A.; Amjad, F.; Armstrong, M.; Behr, K.H.; Benlliure, J.; Bencic, Z.; Dickel, T.; Drozd, V.; Dubey, S.; Ekawa, H.; Escrig, S.; Feijoo-Fontán, M.; Fujioka, H.; Gao, Y.; Geissel, H.; Goldenbaum, F.; González, A.G.; Haettner, E.; Harakeh, M.N.; He, Y.; Heggen, H.; Hornung, C.; Hubbard, N.; Itahashi, K.; Iwasaki, M.; Kalantar-Nayestanaki, N.; Kasagi, A.; Kavatsyuk, M.; Kazantseva, E.; Khreptak, A.; Kindler, B.; Knoebel, R.; Kollmus, H.; Kostyleva, D.; Kraft-Bermuth, S.; Kurz, N.; Liu, E.; Lommel, B.; Metag, V.; Minami, S.; Morrissey, D.J.; Moskal, P.; Mukha, I.; Muneem, A.; Nakagawa, M.; Nakazawa, K.; Nociforo, C.; Rappold, C.; Rodríguez-Sánchez, J.L.
The WASA-FRS project at GSI and its perspective
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 542, 22-25 (2023).
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X23002483>
32. T.R. Saito, P. Achenbach, H. Alibrahim Alfaki, F. Amjad, M. Armstrong, K.H. Behr, J. Benlliure, Z. Bencic, T. Dickel, V. Drozd, S. Dubey, H. Ekawa, S. Escrig, M. Feijoo-Fontán, Y. Gao, H. Geissel, F. Goldenbaum, A. Grãna González, E. Haettner, M.N. Harakeh, Y. He, H. Heggen, C. Hornung, N. Hubbard, K. Itahashi, N. Kalantar-Nayestanaki, A. Kasagi, M. Kavatsyuk, E. Kazantseva, A. Khreptak, R. Knoebel, H. Kollmus, D. Kostyleva, S. Kraft-Bermuth, N. Kurz, E. Liu, S. Minami, D.J. Morrissey, P. Moskal, I. Mukha, A. Muneem, M. Nakagawa, K. Nakazawa, C. Nociforo, H.J. Ong, S. Pietri, J. Pochodzalla, S. Purushothaman, C. Rappold, E. Rocco, J.L. Rodríguez-Sánchez, P. Roy, R. Ruber, N. Saito, S. Schadmand, C. Scheidenberger, P. Schwarz, R. Sekiya, V. Serdyuk, M. Skurzok, B. Streicher, S. Sugimoto, K. Suzuki, B. Szczepanczyk, M. Taki, Y.K. Tanaka, X. Tang, N. Tortorelli, M. Vencelj, H. Wang, T. Weber, H. Weick, M. Will, K. Wimmer, A. Yamamoto, A. Yanai, J. Yoshida, M. Yoshimoto, J. Zhao and WASA-FRS/Super-FRS Experiment Collaboration.
Studies of three- and four-body hypernuclei with heavy-ion beams, nuclear emulsions and machine learning.
Journal of Physics: Conference Series 2586 (2023) 1, 012148 - INPC2022
33. Scattering of ^{15}C on ^{208}Pb at energies near the Coulomb barrier: Study of the experimental device response via the $^{12}\text{C}+^{208}\text{Pb}$ scattering V.G.Távora, J.D. Ovejas, I. Martel, O. Tengblad, M.J.G. Borge, L. Acosta, T. Kurtukian-Nieto, A.M.

- SánchezBenítez, A. di Pietro, P. Figuera, N. Keeley, K. Rusek, and the IS619 collaboration, EuNPC-Proceedings, EPJ Web of Conferences 290 (2023) 02005.
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202329002005>
34. B. Silvestri, P. Armanetti, G. Pota, G. Vitiello, A. Pezzella, L. Menichetti, V. Giannini and G. Luciani.
Enhanced Photoacoustic Response by Synergistic Ag–Melanin Interplay at the Core of Ternary Biocompatible Hybrid Silica-Based Nanoparticles.
 ACS Appl. Mater. Interfaces 15, 46756-46764 (2023).
35. H. Singh, D. Misatziou, C. Wheeler, A. Buendía, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, M. Werts, T. Brown, A. El-Sagheer, A. Kanaras, O. Muskens.
Optical Mie scattering by DNA-assembled three-dimensional gold nanoparticle superlattice crystals.
 ACS Applied Optical Material 1, 69–77 (2023).
36. Stryczyk, M.; Andel, B.; Cubiss, J.G.; Rezyunkina, K.; Rodríguez, T.R.; García-Ramos, J.E.; Andreyev, A.N.; Pakarinen, J.; Van Duppen, P.; Antalic, S.; Berry, T.; Borge, M.J.G.; Clisu, C.; Cox, D.M.; De Witte, H.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Gaffney, L.P.; Harkness-Brennan, L.J.; Huyse, M.; Illana, A.; Judson, D.S.; Konki, J.; Kurcewicz, J.; Lazarus, I.; Lica, R.; Madurga, M.; Marginean, N.; Marginean, R.; Mihai, C.; Mosat, P.; Nacher, E.; Negret, A.; Ojala, J.; Ovejas, J.D.; Page, R.D.; Papadakis, P.; Pascu, S.; Perea, A.; Podolyák, Z.; Próchniak, L.; Pucknell, V.; Rapisarda, E.; Rotaru, F.; Sotty, C.; Tengblad, O.; Vedia, V.; Viñals, et al.
 Simultaneous gamma-ray and electron spectroscopy of Hg 182,184,186 isotopes
 Physical Review C 108, 012023-497 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.014308>
37. Tanaka, P. Achenbach, H. Alibrahim Alfaki, F. Amjad, M. Armstrong, K.H. Behr, J. Benlliure, Z. Brencic, T. Dickel, V. Drozd, S. Dubey, H. Ekawa, S. Escrig, M. Feijoo-Fontán, H. Fujioka, Y. Gao, H. Geissel, F. Goldenbaum, A. Graña González, E. Haettner, M.N. Harakeh, Y. He, H. Heggen, C. Hornung, N. Hubbard, K. Itahashi, M. Iwasaki, N. Kalantar-Nayestanaki, A. Kasagi, M. Kavatsyuk, E. Kazantseva, A. Khreptak, B. Kindler, R. Knoebel, H. Kollmus, D. Kostyleva, S. Kraft-Bermuth, N. Kurz, E. Liu, B. Lommel, V. Metag, S. Minami, D.J. Morrissey, P. Moskal, I. Mukha, A. Muneem, M. Nakagawa, K. Nakazawa, C. Nociforo, H.J. Ong, S. Pietri, J. Pochodzalla, S. Purushothaman, C. Rappold, E. Rocco, J.L. Rodríguez-Sánchez, P. Roy, R. Ruber, T.R. Saito, S. Schadmand, C. Scheidenberger, P. Schwarz, R. Sekiya, V. Serdyuk, M. Skurzok, B. Streicher, K. Suzuki, B. Szczepanczyk, X. Tang, N. Tortorelli, M. Vencelj, H. Wang, T. Weber, H. Weick, M. Will, K. Wimmer, A. Yamamoto, A. Yanai, J. Yoshida, J. Zhao
WASA-FRS Experiments in FAIR Phase-0 at GSI
 Acta Physica Polonica B, Proceedings Supplement 16 (2023) 4, 27 (2023).
38. V.G. Távora, O. Tengblad, M.J.G. Borge, J.A. Briz, D. Fernandez Ruiz, E.A.M. Jensen, A.N. Nerio, and A. Perea.
Populating α -unbound states in ^{16}O via $^{19}\text{F}(p, \alpha y)^{16}\text{O}$ reaction
 EuNPC-Proceedings, EPJ Web of Conferences 290 (2023) 03003.
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202329003003>

39. S. E. T. Ter Huurne, D. B. L. Peeters, J. A. Sánchez-Gil, J. Gómez Rivas.
Direct Measurement of the Local Density of Optical States in the Time Domain.
ACS Photonics 10, 2980-2986 (2023).
40. S. E. T. Ter Huurne, D. R. Abujetas, N. van Hoof, J. A. Sánchez-Gil, J. Gómez Rivas.
Direct Observation of Lateral Field Confinement in Symmetry-Protected THz Bound States in the Continuum.
Advanced Optical Materials 11, 2202403 (2023).
41. Thisse, D; Lebois, M; Verney, D; Wilson, JN; Jovancevic, N; Rudigier, M; Canavan, R; Etasse, D; Adsley, P; Algora, A; Babo, M; Belvedere, K; Benito, J; Benzoni, G; Blazhev, A; Boso, A; Bottoni, S; Bunce, M; Chakma, R; Cieplicka-Orynczak, N; Courtin, S; Cortes, ML; Davies, P; Delafosse, C; Fallot, M; Fornal, B; Fraile, L; Gjestvang, D; Gottardo, A; Guadilla, V; Gerst, RB; Haefner, G; Hauschild, K; Heine, M; Henrich, C; Homm, I; Hommet, J; Ibrahim, F; Iskra, LW; Ivanov, P; Jazrawi, S; Korgul, A; Koseoglou, P; Kroell, T; Kurtukian-Nieto, T., et al.
Study of $N=50$ gap evolution around $Z=32$: new structure information for ^{82}Ge .
European Physical Journal A 59, 012127-S1632 (2023).
<https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-023-01051-2>
42. Wamers, F.; Lehr, C.; Marganec, J.; Aksouh, F.; Aksyutina, Y.; Alvarez-Pol, H.; Atar, L.; Aumann, T.; Beceiro-Novo, S.; Bertulani, C.A.; Boretzky, K.; Borge, M.J.G.; Caesar, C.; Chartier, M.; Chatillon, A.; Chulkov, L.V.; Cortina-Gil, D.; Fernández, P.D.; Emling, H.; Ershova, O.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Galaviz, D.; Geissel, H.; Heil, M.; Holl, M.; Johansson, H.T.; Jonson, B.; Karagiannis, C.; Kiselev, O.A.; Kratz, J.V.; Kulesa, R.; Kurz, N.; Langer, C.; Lantz, M.; Le Bleis, T.; Lemmon, R.; Litvinov, Y.A.; Mahata, K.; Müntz, C.; Nilsson, T.; Nociforo, C.; Ott, W.; Panin, V.; Paschalis, S.; Perea, A.; Plag, R.; Reifarh, R.; Richter, A.; Rodriguez-Tajes, C.; Tengblad, O.
Diverse mechanisms in proton knockout reactions from the Borromean nucleus ^{17}Ne
European Physical Journal A 59 266–270 (2023).
<https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-023-01063-y>
43. Wimmer, K.; Ruotsalainen, P.; Lenzi, S.M.; Poves, A.; Hüyük, T.; Browne, F.; Doornenbal, P.; Koiwai, T.; Arici, T.; Auranen, K.; Bentley, M.A.; Cortés, M.L.; Delafosse, C.; Eronen, T.; Ge, Z.; Grahn, T.; Greenlees, P.T.; Illana, A.; Imai, N.; Joukainen, H.; Julin, R.; Jungclaus, A.; Jutila, H.; Kankainen, A.; Kitamura, N.; Longfellow, B.; Louko, J.; Lozeva, R.; Luoma, M.; Mauss, B.; Napoli, D.R.; Niikura, M.; Ojala, J.; Pakarinen, J.; Pereira-Lopez, X.; Rahkila, P.; Recchia, F.; Sandzelius, M.; Sarén, J.; Taniuchi, R.; Tann, H.; Uthayakumaar, S.; Uusitalo, J.; Vaquero, V.; Wadsworth, R.; Zimba, G.; Yajzey, R.
Isospin symmetry in the $T=1, A=62$ triplet
Physics Letters B 847, 024323–13 (2023).
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037026932300583X?dgcid=rss_sd_all
44. X. Xiao, R. Gillibert, A. Foti, P. E. Coulon, C. Ulysse, T. Levato, S. A. Maier, Vincenzo Giannini, P. G. Gucciardi, and G. Rizza.
Plasmonic Polarization Rotation in SERS Spectroscopy.
Nano Letters 23, 2530-2535 (2023).

45. X. Xiao, J. Lu, F. Alzaabi, M. Almheiri, V. Giannini, T. Levato.
Fast decomposed method to devise broadband polarization-conversion metasurface.
Scientific Reports 13, 8196-2535 (2023).
46. Yates, D.; Krücken, R.; Dillmann, I.; Garrett, P.E.; Olaizola, B.; Vedia, V. et al.
Decay spectroscopy of ^{160}Eu : Quasiparticle configurations of excited states and structure of $K^\pi = 4^+$ bandheads in ^{160}Gd .
Physical Review C 107, 064309 (2023).
<https://www.scopus.com/inward/record.uri?partnerID=HzOxMe3b&scp=85164477808&origin=inward>
47. T. Zorlu, I. B. Becerril-Castro, B. Puertolas, V. Giannini, M. A. Correa-Duarte and R. A. Alvarez-Puebla
Yolk-Shell Nanostars@ Metal Organic Frameworks as Molecular Sieves for Optical Sensing and Catalysis.
Angewandte Chemie International Edition Ed. 62, e202305299 (2023).
48. V. Zuffi, F. Puliga, A. Zambonelli, L. Trincone, S. Sanchez-Cortes, O. Francioso.
*Sustainable Management of Anaerobic Digestate: From Biogas Plant to Full-Scale Cultivation of *Pleurotus ostreatus*.*
Agronomy 2023, Vol. 13, Page 950. 13, 950 (2023).

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY DEPARTMENT

49. Xu, Z.Y.; Madurga, M.; Grzywacz, R.; King, T.T.; Algora, A.; Andreyev, A.N.; Benito, J.; Berry, T.; Borge, M.J.G.; Costache, C.; De Witte, H.; Fijalkowska, A.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Gottardo.
A beta-delayed neutron spectroscopy of ^{133}In .
Physical Review C 108, 789–792 (2023).
<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.108.014314>
50. Xu, Z.Y.; Madurga, M.; Grzywacz, R.; King, T.T.; Algora, A.; Andreyev, A.N.; Benito, J.; Berry, T.; Borge, M.J.G.; Costache, C.; De Witte, H.; Fijalkowska, A.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Gottardo, A.
 ^{133}In : A Rosetta Stone for Decays of r -Process Nuclei.
Physical Review Letters 131, UNSP 01031-4432711
<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.131.022501>

PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR / PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE MOLECULAR PHYSICS DEPARTMENT

51. Timón, V.; Torrens-Martín, D.; Fernández-Carrasco, L.J.; Martínez-Ramírez, S.
Infrared and Raman vibrational modelling of β -C₂S and C₃S compounds
Cement and Concrete Research 169, 107162 (2023).

1. Divita Gupta; Wesley G. D. P. Silva; José L. Doménech; Eline Plaar; Sven Thorwirth; Stephan Schlemmer; Oskar Asvany.
High-resolution rovibrational and rotational spectroscopy of the singly deuterated cyclopropenyl cation, $c\text{-C}_3\text{H}_2\text{D}^+$.
Faraday Discussions 245, 298-308 (2023).
2. Belén Maté, Isabel Tanarro, Vicente Timón, José Cernicharo, and Victor J Herrero,
Infrared spectra of solid indene pure and in water ice: implications for observed IR absorptions in TMC-1.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 523(4), 5887–5898, 2023.
DOI:10.1093/mnras/stad1761
3. Germán Molpeceres, Víctor M Rivilla, Kenji Furuya, Johannes Kästner, Belén Maté, Yuri Aikawa,
Processing of hydroxylamine, NH_2OH , an important prebiotic precursor, on interstellar ices.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 521(4), 6061–6074, 2023.
DOI:10.1093/mnras/stad892
4. D. Paredes-Roibás and R. Z. Martínez.
High-resolution stimulated Raman spectroscopy of low-frequency rotational transitions: Obtention of collisional broadening coefficients in the rotational S branch of CO perturbed by H_2 .
Journal of Raman Spectroscopy 54, 1099 (2023).
5. D. Paredes-Roibás, R. Z. Martínez and F. Thibault.
Measurements and calculations of collisional line broadening and mixing in the Raman spectrum of N_2 perturbed by CO.
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 302, 108560 (2023).
6. W.G.D.P. Silva, J. Cernicharo, S. Schlemmer, N. Marcelino, J.C. Loison, M. Agúndez, D. Gupta, V. Wakelam, S. Thorwirth, C. Cabezas, B. Tercero, J.L. Doménech, R. Fuentetaja, W.-J. Kim, P. de Vicente and O. Asvany,
Discovery of H_2CCCH^+ in TMC-1.
Astronomy and Astrophysics 676, L1 (2023).
7. Silva, W. G. D. P., Gupta, D., Plaar, E., Doménech, J. L., Schlemmer, S., & Asvany, O. (2023). *High resolution rovibrational and rotational spectroscopy of H_2CCCH^+* Molecular Physics e2296613. <https://doi.org/10.1080/00268976.2023.2296613>
8. Carla Tamai, Belén Maté, Stéphanie Cazaux and Miguel Ángel Satorre.
Laboratory experiments on the sublimation of methane through ice dust layers and applications to cometary activity.
Astronomy and Astrophysics 675 (2023) A47.
DOI: 10.1051/0004-6361/202346358

**PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE ENVYMED / PUBLICATIONS
IN COMMON WITH THE ENVYMED DEPARTMENT**

9. Timón, V., Torrens-Martín, D., Fernández-Carrasco, L. J., & Martínez-Ramírez, S.
Infrared and Raman vibrational modelling of β -C2S and C3S compounds.
Cement and Concrete Research, 169, 107162 (2023).

**PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA
TEÓRICAS/ PUBLICATIONS IN COMMON WITH THE THEORETICAL PHYSICS AND
CHEMISTRY DEPARTMENT**

10. C. Adjal, V. Timón, N. Guechtouli, R. Boussessi, D. Hammoutene, and M.L. Senent.
The role of water in the adsorption of Nitro-organics pollutants on Activated Carbon.
The Journal of Physical Chemistry A, 127, p.8146 (2023).

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR
PHYSICS**

1. V.L.Cruz, V.Souza-Egipsy, M Gion, J.Pérez-García, J. Cortes, J. Ramos, J.F.Vega.
*Binding Affinity of Trastuzumab and Pertuzumab Monoclonal Antibodies to
Extracellular HER2 Domain.*
International Journal of Molecular Sciences 2023, 24(15), 12031 (2023).
2. J Cui, A Nogales, TA Ezquerra, E Rebollar.
*Effect of film thickness on laser induced surface structures formation on optically
transparent polymer films.*
Applied Surface Science 2023, 639, 158148
3. J Cui, E Rebollar, TA Ezquerra, A Nogales.
*Dewetting effects in poly(vinylidene fluoridetrifluoroethylene) thin films on Poly(3-
hexylthiophene) substrates.*
ACS Applied Polymer Materials 2023, 5(10) 8005-8011.
4. O. Gálvez, O Toledano, FJ Hermoso, A Linares, M Sanz, E Rebollar, A Nogales,
MC García-Gutiérrez, G Santoro, I Irska, S Paszkiewicz, A Szymczyk, TA Ezquerra.
*Inter and intra molecular dynamics in Poly(trimethylene 2,5-furanoate) as revealed
by Infrared and Broadband Dielectric Spectroscopies.*
Polymer 2023, 268, 125699
5. Gutiérrez-Fernández Edgar, Sena-Fernández J, Rebollar E, Ezquerra TA, Hermoso-
Pinilla FJ, Sanz M, Gálvez O, Nogales A.
*Development of polar phases in ferroelectric poly(vinylidene fluoride) (PVDF)
nanoparticles.*
Polymer 2023, 268, 125540

6. L.León Boigues, A.Flores, M.A.Gómez Fatou, J.F.Vega, G.J.Ellis, H.J. Salavagione. *PET/Graphene Nanocomposite Fibers Obtained by Dry-Jet Wet-Spinning for Conductive Textiles*. *Polymers* 15, 1245 (2023).
7. P Martínez-García, A Nogales, MC García-Gutiérrez, J Sena-Fernández, TA Ezquerra, E Rebollar. *3D Printing Assisted Nano Imprint Lithography of Polymer*. *Advanced Engineering Materials* 2023 2300344
8. M. Palenzuela, J.F. Vega, V. Souza-Egipsy, J. Ramos, C. Rentero, V. Sessini, M.E.G. Mosquera. *Insight into the melt-processed polylimonene oxide/polylactic acid blends*. *Polymer Chemistry* 14, 4530-4537 (2023).
9. Paszkiewicz S., Irska I, Zubkiewicz A., Walkowiak K., Rozwadowski Z., Dryzek J., Linares A., Nogales A., Ezquerra T.A. *Supramolecular structure, relaxation behavior and free volume of bio-based poly(butylene 2,5-furandicarboxylate)-block-poly(caprolactone) copolyesters*. *Soft Matter* 2023,19(5),959-972. DOI10.1039/d2sm01359b
10. Prada-Rodrigo, J.; Rodríguez-Beltrán, R.I.; Ezquerra, T.A.; Moreno, P.; Rebollar, E. *Influence of film thickness and substrate roughness on the formation of laser induced periodic surface structures in poly(ethylene terephthalate) films deposited over gold substrates*. *Optics & Laser Technology* (IF 5). <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2022.109007>
11. Spilsbury, M.J.; Feito, A.; Delgado, A.; Capitán, M.J.; Álvarez, J.; de Miguel, J.J. *Enantiosensitive growth dynamics of chiral molecules on ferromagnetic substrates and the origin of the CISS effect*. *Journal of Chemical Physics* 159, 114706. <https://doi.org/10.1063/5.0160011>
12. J.F. Vega, M. Fernández, A. Cardil, I. Calafel, I. Martínez-Soroa, A. Pérez Sarriegui, A. Acera. *Shedding light on the viscoelastic behavior of artificial and human tears: A microrheological approach*. *Physics of Fluids* 35, 072008 (2023).
13. J.F. Vega, A.J. Müller. *Editorial for the special issue "In memoriam of Javier Martínez Salazar"* *Polymer* 125871 (2023).
14. Walkowiak K., Paszkiewicz S., Irska I., Kochmanska A., Dydek K., Boczkowska A., Stanik R., Gude M., Linares A., Ezquerra T.A. *Furan-Based Bionanocomposites Reinforced with a Hybrid System of Carbon Nanofillers*. *Advanced Engineering Materials* 2023,25(13) 2300046(1-13). DOI10.1002/adem.202300046

PUBLICACIONES EN REVISTAS NO JCR/ISI / NON JCR-ISI PUBLICATIONS

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

1. J. Fernando Barbero González.
Física, gravitación y relatividad en España: Dos décadas de progresos a través de su sociedad científica.
Encuentros multidisciplinares 25, Número 73 (enero-abril) (2023).

LIBROS, MONOGRAFÍAS Y OTRAS PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS / BOOKS, PROCEEDINGS AND OTHER PUBLICATIONS

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

1. A. Bas i Beneito, G. Calcagni, and L. Rachwal.
Classical and quantum nonlocal gravity. In C. Bambi, L. Modesto, I.L. Shapiro (eds.), Handbook of Quantum Gravity (Springer, Switzerland, 2023).
ISBN 978-981-19-3079-9.
2. A. García-Quismondo and G.A. Mena Marugán.
Revisiting the Hamiltonian Formalism of the Ashtekar-Olmedo-Singh Black Hole Model.
Proceedings of the 16th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, Part D
pgs. 4211-4227.
Remo Ruffini and Gregory Vereshchagin (Eds.), Springer (Singapore), 2023.
ISBN 9789811269776.
3. B. Elizaga Navascués, R. Jiménez-Llamas, and G.A. Mena Marugán.
Primordial Perturbations in Kinetically Dominated Regimes of Classical and Quantum Cosmology.
Proceedings of the 16th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, Part D
pgs. 4193-4210.
Remo Ruffini and Gregory Vereshchagin (Eds.), Springer (Singapore), 2023.
ISBN 9789811269776.
4. M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, I.C. Danchev, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, and D.N. Kadrev.
An alternative approach within the CDFM for studies of nuclear symmetry energy components and their ratio.
Proceedings of Science vol 427, 11th International Conference of the Balkan Physical Union (BPU11).
DOI: <https://doi.org/10.22323/1.427.0015>.

5. M. Hita-Pérez, L. Muñoz, and R.A. Molina.
Code and data for “Missing levels in intermediate spectra”.
Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.8434033>, 2023.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / MOLECULAR PHYSICS

1. J. Cernicharo, C. Cabezas, J. D. Gallego, F. Tercero, J. A. López-Pérez, P. de Vicente, B. Tercero, I. Tanarro, J. L. Domenech, V. J. Herrero, M. Agúndez, N. Marcelino, J. R. Pardo, J. A. Martín-Gago & C. Joblin.
The Nanocosmos Receivers for Laboratory Astrophysics and Radioastronomical Observations: GACELA and QUIJOTE.
In: Mennella, V., Joblin, C. (eds) European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2020. ECLA 2021.
Astrophysics and Space Science Proceedings, vol 59, pp 35-49. (2023) Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-29003-9_4
2. Miguel Jiménez-Redondo, Lidia Díaz-Pérez, Ramón J. Peláez, Belén Maté, Isabel Tanarro, and Víctor J. Herrero.
Generation of Interstellar Carbonaceous Dust Analogs in C₂H₂ Plasmas: Gas-Phase Reactions and Particle Properties
In: Mennella, V., Joblin, C. (eds) European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2020. ECLA 2021.
Astrophysics and Space Science Proceedings, vol 59, pp pp 111–117. (2023) Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-29003-9_13
3. S. Thorwirth, O. Asvany, T. Salomon, M. Bast, P. C. Schmid, I. Saviç, M. E. Harding, J. L. Doménech and S. Schlemmer.
Spectroscopic studies of acylium- and thioacylium ions
In: V. Ossenkopf-Okada, R. Schaaf, I. Breloy, J. Stutzki (eds.) Physics and Chemistry of Star Formation The Dynamical ISM Across Time and Spatial Scales. Proceedings of the 7th Chile-Cologne-Bonn-Symposium, pp 291-293 (2023).
Universität und Stadtbibliothek Köln - ISBN 978-3-00-074740-3
<https://doi.org/10.18716/kups/64624>

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

1. J. Sobrado, G. Santoro, L. Martínez, P. Merino, C. Joblin, J. Cernicharo and J. A. Martín-Gago.
“The Stardust Machine Project” in “European Conference on Laboratory Astrophysics ECLA2020”. Serie: Astrophysics and Space Science Proceedings. V. Mennella, C. Joblin (Eds.), Springer International Publishing, chapter 12 p. 101-110 (2023). Space Science Proceedings 59, Eds. V. Mennella, C. Joblin.
ISBN: 978-3-031-29002-2

BASES DE DATOS Y CÓDIGOS INFORMÁTICOS DE ACCESO ABIERTO/ OPEN ACCESS DATA BASES AND COMPUTER CODES

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

1. M. Hita-Pérez, L. Muñoz, and R.A. Molina.
Code and data for “Missing levels in intermediate spectra”.
Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.8434033>, 2023.

TESIS DOCTORALES / Ph.D. Theses

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Efectos de la Cosmología Cuántica de Lazos en Perturbaciones Primordiales y en Espaciotiempos de Agujero Negro.

University: Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma de Madrid.

Date: 10 March 2023

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: **Alejandro García-Quismondo Martín**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán**

Title: Study of gravitational theories through Hamiltonian methods and consistent deformations.

University: Universidad Carlos III de Madrid (Escuela Politécnica Superior).

Date: 24 February 2023

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: **Marc Basquens Muñoz**

Supervisors: **J. Fernando Barbero González, and Eduardo J. Sánchez Villaseñor.**

Title: Two problems in one particle Quantum Transport -Dynamic localization and Topological semimetals.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 12 May 2023

Mark: Sobresaliente

Candidate: **Enrique Benito Matías**

Supervisor: **Rafael Alejandro Molina Fernández**

Title: Quantum transport in Dirac materials under external fields and disorder.

University: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: 20 October 2023

Mark: Sobresaliente “cum laude”

Candidate: **Yuriko Baba**

Supervisor: **Rafael Alejandro Molina Fernández and Francisco Domínguez Adame**

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

Title: Spectroscopic characterizations of Ferrogallic Inks and related pigments with interest in Cultural Heritage.

University: P.J. Safarik in Kosice / Universidad Autónoma de Madrid, cotutoring thesis

Date: 20th February 2023

Mark: Sobresaliente cum laude

Candidate: **Alba Espina García**

Supervisor: **Zuzana Jurašeková y Santiago Sánchez Cortés**

Title: Development of nanosensors based on plasmonic-enhanced optical spectroscopy for molecular sensitive and selective detection of glyphosate.

University: P.J. Safarik in Kosice

Date: 28 November 2023

Mark: Sobresaliente cum laude

Candidate: **Francisca Fuenzalida Sandoval**

Supervisor: **Zuzana Jurašeková y Santiago Sánchez Cortés**

TRABAJOS DE MÁSTER, GRADO Y OTRAS TITULACIONES
Master, Grade and other Degrees Theses

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS / THEORETICAL PHYSICS AND CHEMISTRY

Title: Pre-inflationary Effects on the Primordial Power Spectrum of Cosmological Perturbations in Scenarios with Kinetic Dominance.

Type: **Master thesis**

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 15 June 2023

Candidate: **Jesús Yébana Carrillero**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán**

Title: Black Holes in Loop Quantum Cosmology: Quantization of the AOS Model.

Type: **Master thesis**

University: Universidad Complutense de Madrid.

Date: 15 June 2023.

Candidate: **Andrés Mínguez Sánchez**

Supervisor: **Guillermo A. Mena Marugán**

Title: Cosmological Perturbations and Primordial Power Spectrum in Modified Gravity: from the Thermodynamics of Spacetime to Loop Quantum Cosmology.

Type: **Master thesis**

University: École Polytechnique (Francia).

Date: 20 julio 2023

Candidate: **Antonio Vicente Becerril**

Supervisor: **Ana Alonso Serrano and Guillermo A. Mena Marugán**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MOLECULAR / *MOLECULAR PHYSICS*

Title: **Espectroscopía Raman: Experimentación y Cálculos Químico-Cuánticos.**

Type: **Grade thesis**

University: Universidad Complutense de Madrid

Date: 22 June 2023

Mark: 9.7/10

Candidate: **Marcos de Lucas Medina**

Supervisor: **José M. Fernández Sánchez**

Title: **Estudio de Flujos de H₂ Mediante Espectroscopía Raman.**

Type: **Grade thesis**

University: Universidad Rey Juan Carlos

Date: 22 March 2023

Mark: 8/10

Candidate: **Nerea Mota Peinado**

Supervisor: **José M. Fernández Sánchez**

Title: **Cosmología Cuántica de Lazos**

Type: **Practicas Externas de grado**

University: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Date: October-December 2023

Candidate: **David Gómez Arroyo**

Supervisor: **Belén Maté Naya**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR / *MACROMOLECULAR PHYSICS*

Title: **Propiedades físico-químicas de biopolímeros de origen bacteriano combinando experimentos y simulaciones por ordenador.**

Type: **Master Thesis**

University: Universidad Internacional Menéndez Pelayo

Date: 21 June 2023

Mark: Notable

Candidate: **Emma Franco Mateos**

Supervisor: **Javier Ramos Días and Juan Francisco Vega Borrego**

Title: **Estudio conformacional mediante técnicas computacionales de polisacáridos de origen bacteriano.**

Type: **Grade Thesis**

University: Universidad Rey Juan Carlos

Date: 10 October 2023

Mark: Notable

Candidate: **Alba Gradío Izquierdo**

Supervisor: **Javier Ramos Días and Juan Francisco Vega Borrego**

CAPÍTULO 7 – TABLAS Y DATOS
CHAPTER 7 – TABLES AND DATA

INDICADORES DE PUBLICACIONES Y FORMACIÓN /
PUBLICATIONS AND TRAINING INDICATORS

	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023
Number of ISI publications	148	146	156	156	134	88	97
Number of non-ISI publications	3	2	3	3	0	8	9
Total stock of PhD fellowships and contracts	18	17	19	19	19	15	22
Number of PhD Theses defended	4	4	3	3	4	2	6

RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS JCR-ISI / SUMMARY
OF PUBLICATIONS IN JCR-ISI-JOURNALS

JOURNAL	IMPACT FACTOR (JCR -2022)	NUMBER OF PAPERS
Living Reviews in Relativity	40.6	1
Nature Communications	16.6	2
Angewandte Chemie International Edition	16.6	1
Small Science	12.7	1
Cement and Concrete Research	11.4	1
Carbon	10.9	1
Nano Letters	10.8	2
ACS Applied Materials and Interfaces	9.5	1
Advanced Optical Materials	9	1
Physical Review Letters	8.6	3
Nanophotonics	7.5	1
ACS Photonics	7	2
Applied Surface Science	6.7	1

Chemical and Biological Technologies in Agriculture	6.6	1
Astronomy and Astrophysics	6.5	2
Journal of Cosmology and Astroparticle Physics	6.3	1
Surfaces and Interfaces	6.2	1
International Journal of Molecular Sciences	5.6	1
Journal of High Energy Physics	5.4	2
Physical Review D	5	2
ACS Applied Polymer Materials	5	1
Optics and Laser Technology	5	1
Polymers	5	1
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	4.8	3
Scientific Reports	4.6	2
Physics of Fluids	4.6	1
Polymer	4.6	3
Polymer Chemistry	4.6	1
Journal of Chemical Physics	4.4	2
Physics Letters B	4.3	4
ACS Omega	4.1	1
Physical Review B	3.7	3
Agronomy-Basel	3.7	1
Advanced Engineering Materials	3.6	2
European Physical Journal Plus	3.4	1
Faraday Discussions	3.4	1
Soft Matter	3.4	1
Physical Review C	3.1	10
The journal of physical chemistry, A	2.9	1
Computational and Theoretical Chemistry	2.8	1
Crystals	2.7	1
European Physical Journal A	2.6	5
Journal of Raman Spectroscopy	2.5	1
Mathematics	2.4	1
Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer	2.3	1
Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	2.1	1
European Physical Journal D	1.8	1
Learning and Behavior	1.8	1
Heritage	1.7	1
Molecular Physics	1.6	1
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A	1.4	1

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B	1.3	2
Acta Physica Polonica B, Proceedings Supplement	0.5	1
EPJ Web of Conferences		7
ACS Applied Optical Material		1
Journal of Physics: Conference Series		1
Nuclear Physics News		1
TOTAL	Average Impact Factor: 5.46	97

EVOLUCIÓN DEL ÍNDICE DE IMPACTO (REVISTAS JCR- ISI) POR DEPARTAMENTOS / *EVOLUTION OF THE IMPACT FACTOR (JCR-ISI-JOURNALS) BY DEPARTMENTS*

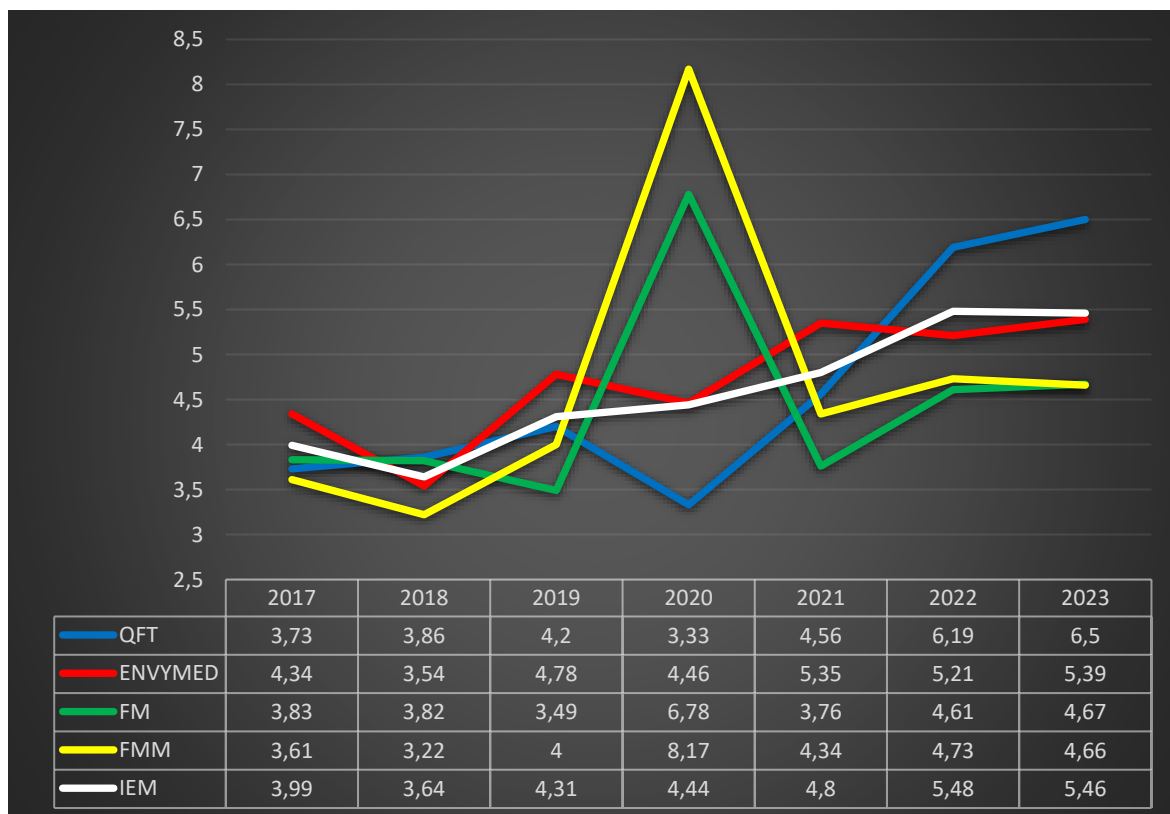
Department Key:

Theoretical Physics and Chemistry (**QFT**)

Molecular Physics (**FM**)

Macromolecular Physics (**FMM**)

Nuclear, Vibrational and Disordered Media Spectroscopy (**ENVYMED**)



PERSONAL POR DEPARTAMENTOS *PERSONNEL BY DEPARTMENTS*

Department	Scientific Staff		"Ramón & Cajal" and PostDoc		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		4				12	1	13
ENVYMED	6	5	2				8	4	1	1	17	10	27
FM	9	2					2	1	2		13	3	16
FMM	5	3					4	1	2	2	11	6	17
ADMON.									1	6	1	6	7
IEM	27	11	2		1		18	6	6	9	54	26	80

¹"Authorized Stay" excluded

(M: Male, F: Female. See also the "Department Key" in section 7.3)

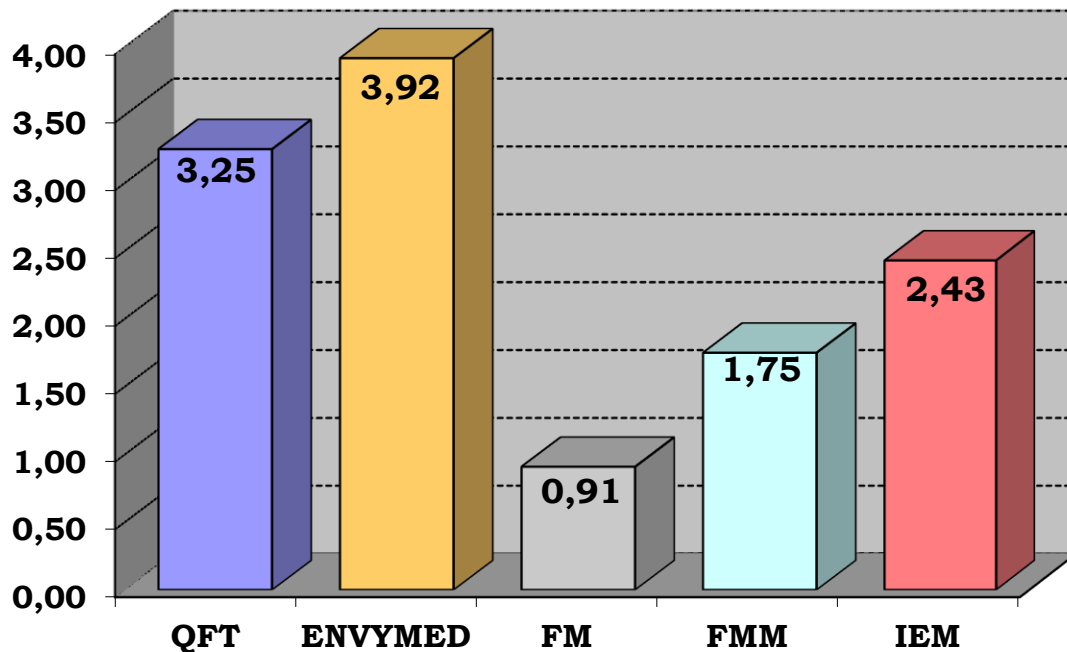
Personal del IEM sin incluir Doctores Vinculados / 79

Personnel of the IEM excluding the Adjoint Researchers: 79

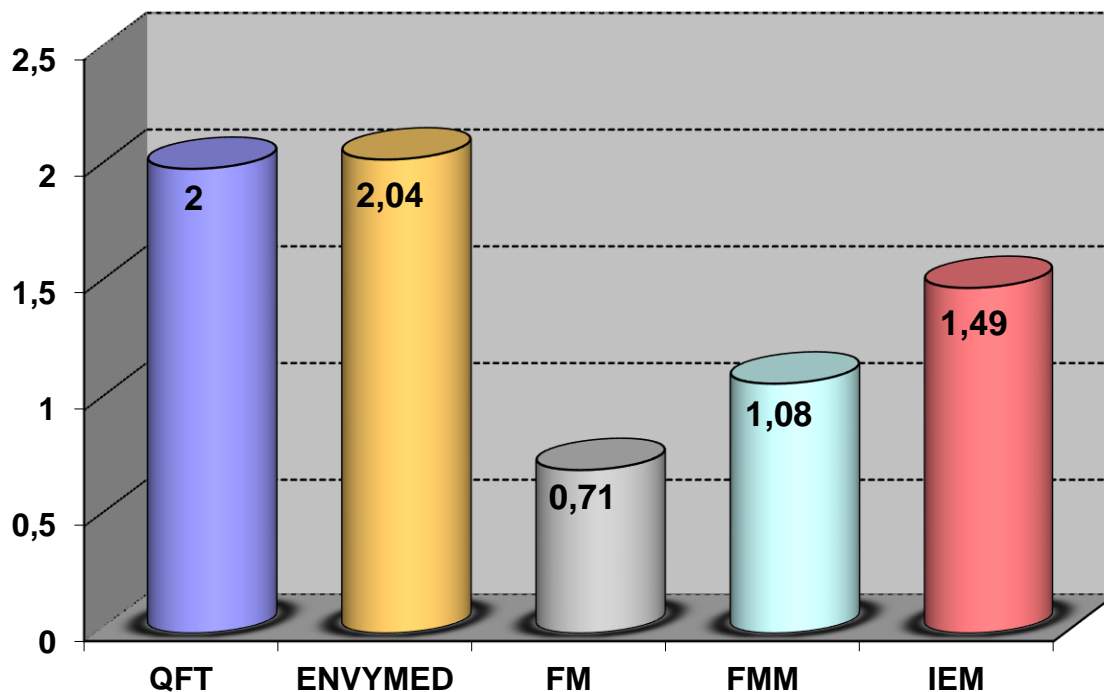
NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DEPARTAMENTOS *NUMBER OF PAPERS BY DEPARTMENTS*

	QFT	ENVYMED	FM	FMM
ISI publications	26	51	10	14
Other publications	6		3	1

RATIO DE PUBLICACIONES JCR-ISI POR DEPARTAMENTOS
RATIO OF JCR-ISI PUBLICATIONS BY DEPARTMENTS



- **Ratio por investigador SENIOR (personal de plantilla más contratados “R&C” y “PostDoc”)**
Ratio by senior researcher (staff plus “R&C” and “PostDoc”)



- **Ratio por personal científico (sin incluir personal de apoyo)**
Ratio by scientific staff (excluding support staff)

- **Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal investigador senior (plantilla): 2,55**
Ratio of ISI publications of IEM per senior staff researcher