

## DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA TIERRA Y FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

Avda. de Los Castros, s/n. Facultad de Ciencias  
39005 - Santander  
Teléfono: 942 201513  
Fax: 942 201402

Director: Jesús Rodríguez Fernández  
Subdirector: Juan Remondo Tejerina  
Administradora: Rosa Cuadra Martínez

### PERSONAL DOCENTE E INVESTIGADOR

#### Área de conocimiento 1: Física de la Materia Condensada

##### *Catedráticos de Universidad*

José Antonio Aramburu-Zabala Higuera  
José Carlos Gómez Sal  
Miguel Moreno Mas  
Jesús Rodríguez Fernández  
Fernando Rodríguez González

##### *Profesores Titulares de Universidad*

José Ignacio Espeso Martínez  
Luis Fernández Barquín  
Javier Junquera Quintana

##### *Catedráticos de Escuela Universitaria*

Rafael Jesús López Sánchez

##### *Profesores Titulares de Escuela Universitaria*

Amada Rodríguez Gutiérrez  
José Javier Sandonis Ruiz  
Rafael Tapia Martín

##### *Profesor Contratado Doctor*

Fernando Aguado Menéndez

##### *Investigadores Contratados Doctores*

Pablo García Fernández (Contratado Proyecto Europeo Oxide)  
Susana Gómez Salces (Contratada de Proyectos)  
Jesús Antonio González Gómez (Proyecto MALTA)  
Ignacio Hernández Campo (Marie Curie Programme.- European Commission)

*Investigadores Contratados*

Pedro Villanueva Delgado

*Becarios*

Abel García Saiz (FPU)

Cristina Echevarría Bonet (FPI)

**Área de conocimiento 2: Geodinámica Externa**

*Profesor Emérito*

Antonio Cendrero Uceda

*Profesores Titulares de Universidad*

José Ramón Díaz de Terán Mira

Enrique Francés Arriola

Alberto González Díez

Juan Remondo Tejerina

*Profesor Ayudante Doctor*

Jaime Bonachea Pico

*Profesores Asociados*

Francisco Javier Barba Regidor (MEC)

Juan Antonio González Lastra

*Investigadores Contratados Doctores*

Viola María Bruschi (Proyecto SUDOE)

**Área de conocimiento de Geodinámica Interna**

*Profesor Titular de Universidad*

Jesús Saiz de Omeñaca

**Área de conocimiento de Prospección e Investigación Minera**

*Profesora Ayudante Doctor*

Gema Fernández Maroto

*Profesor Asociado*

Patricio Martínez Cedrun

**PERSONAL TÉCNICO DE APOYO**

José Antonio Barreda Argüeso

Imanol de Pedro del Valle

**PERSONAL DE ADMINISTRACIÓN Y SERVICIOS**

Rosa Cuadra Martínez

Nieves Merino Hoyal  
Luis Echeandía Soler  
Francisco Javier Torralbo Díez

## ESTANCIAS EN EL DEPARTAMENTO

- Marko Peric.- Universidad de Belgrado.- Grupo de Física Computacional.- 19-31 de marzo de 2012
- Dr. Edgar Belandria.- Departamento de Física de la Universidad de Los Andes de Mérida, Venezuela.- Grupo de Altas Presiones.- 1 al 10 de octubre de 2012
- Dra. Maja Gruden-Paulovic.- Universidad de Belgrado, Serbia.- Grupo de Física Computacional.- 13-21 de noviembre de 2012
- Yiwei Sun, estudiante de Doctorado de la Universidad Queen Mary of London.- Grupo de Altas Presiones.- 26-30 de noviembre de 2012 y 13-17 de mayo de 2013.
- Dr. Alfredo Franco.- UNAM/U. Fidel Velazquez, Mejico ).- Grupo de Altas Presiones.- 13-14 de Junio de 2013.
- Dr. Matija Zlatar.- Universidad de Belgrado, Serbia.- Grupo de Física Computacional.- 13-21 de noviembre de 2012
- Daniel Galvao Veronez Parizoto.- Universidad Federal de Santa Catarina (Florianópolis-Brasil).- Grupo de Geodinámica Externa.- Doctorado Sandwich. 15 de abril a 30 de septiembre de 2013
- Giulia Barca.- Grupo de Geodinámica Externa.- Estudiante ERASMUS (Universita di Modena e Reggio Emilia, Italia).- Febrero-Junio 2013

## DOCENCIA

### Centros en los que imparte docencia

E.T.S. de Ingenieros Industriales y de Telecomunicaciones

E. U. de Ingeniería Técnica Minera

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

Facultad de Educación

Facultad de Ciencias

### Programa Sénior

- Impartición de la asignatura “Dinámica y Evolución de la Tierra” por el profesor José Ramón Díaz de Terán, con treinta y cinco alumnos. Se realizó una visita al museo del Jurásico de Asturias.
- Impartición de la asignatura “La Tierra, ¿un planeta peligroso?”, por el profesor José Ramón Díaz de Terán, con una veintena de alumnos.
- Impartición del Taller “La materia y sus propiedades” por los profesores Jesús Rodríguez Fernández y Fernando Rodríguez González

### Campus Científico de Verano

El departamento vuelve a participar en el Campus Científico de Verano que la Universidad de Cantabria desarrolla a lo largo del mes de julio, a través del proyecto de materiales titulado: "Explorando la estructura de la materia cristalina y sus simetrías". Dicho proyecto, dirigido a estudiantes destacados de primero de Bachiller y cuarto de la ESO de toda España, tiene como objetivo analizar la estructura cristalina de algunos materiales sencillos, utilizando las técnicas de microscopía óptica y difracción de rayos X.

### **Programas de postgrado**

#### *Másteres Oficiales*

Master Europeo en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling".

Coordinador: José Antonio Aramburu-Zabala Higuera.

Master Universitario en Ciencia de Materiales.

Coordinador: profesor Luis Fernández Barquín.

Master en Técnicas de Análisis, Evaluación y Gestión Sostenible de Procesos y Riesgos Naturales.

Coordinador: profesor Alberto González Díez.

#### *Estudios Propios*

Participación en la docencia en el Master Universitario en Ingeniería Ambiental.

## **INVESTIGACIÓN**

### **Líneas generales de investigación**

- Objetos de aprendizaje y diseños de aprendizaje para la enseñanza de la Física.
- Cambio global y procesos geológicos superficiales.
- Evaluación y planificación ambiental; indicadores ambientales.
- Influencia de actividades humanas en procesos geomorfológicos.
- Cartografía geocientífica aplicada a la planificación del territorio.
- Análisis y evaluación de riesgos naturales.
- Inestabilidad de laderas y taludes naturales.
- Subsistencia kárstica
- Aplicación de técnicas de auscultación basadas en fotogrametría digital y sensores remotos al análisis de procesos superficiales.
- Análisis y modelización de procesos superficiales en entornos SIG.
- Problemática ambiental de zonas litorales.
- Evaluaciones de impacto ambiental.
- Restauración ambiental de zonas degradadas.
- Caracterización y cartografía de comunidades vegetales.
- Aplicaciones didácticas y divulgativas del conocimiento del medio natural.
- Rocas industriales y sus aplicaciones.
- Simulación computacional de moléculas, agregados atómicos y materiales puros e impurificados.
- Inestabilidades *on-center* y *off-center* en moléculas y materiales puros e impurificados.

- Acoplamiento entre los movimientos electrónicos y vibraciones nucleares: efectos Jahn-Teller y pseudo-Jahn-Teller.
- Desplazamiento de átomos en redes cristalinas aislantes y semiconductoras.
- Mecanismos de transferencia de protones en moléculas y sólidos.
- Transiciones de fase en sólidos.
- Simulación computacional de materiales ferroeléctricos y piezoeléctricos.
- Desarrollos teóricos y computacionales para la simulación de defectos en sólidos desde primeros principios: cálculos en serie y en paralelo.
- Implementación de nuevos algoritmos dentro del formalismo de la teoría del funcional de la densidad para el tratamiento de campos eléctricos.
- Estandarización de los formatos de entrada/salida entre diferentes códigos desde primeros principios.
- Propiedades electrónicas ópticas y magnéticas de iones de transición en materiales no metálicos.
- Efectos de presión sobre materiales puros e impurificados. Diferencias entre los efectos de la presión hidrostática y la presión química.
- Implementación de nuevos algoritmos de simulación de dinámica molecular para la inclusión de efectos cuánticos.
- Propiedades de materiales en condiciones extremas de altas presiones.
- Desarrollo de técnicas de espectroscopia y alta presión.
- Semiconductores orgánicos, interrelación entre estructura y propiedades optoelectrónicas y de spin.
- Espectroscopía de tierras raras y de iones de metales de transición en materiales orgánicos e inorgánicos.
- Transferencia de energía entre moléculas. Up-conversion y Quantum-Cutting.
- Físico-Química y estudio a altas presiones de nanopartículas, semiconductores orgánicos y materiales híbridos orgánico-inorgánicos.
- Nanotubos de carbono, grafeno y otras nano-estructuras de carbono.
- Propiedades ópticas de materiales. Piezocroismo, termocroismo y fenómenos luminiscentes.
- Correlaciones ópticas, magnéticas y estructurales en sistemas Jahn-Teller de Cu(II), Mn(III), Ni(III), Co(III).
- Procesos luminiscentes de upconversion en sistemas mixtos Tierra Rara-Metal de Transición.
- Cambios de estructura cristalina y de estado magnético inducidos por altas presiones.
- Defectos en silicio impurificado con litio y oxígeno: Espectroscopia FTIR de alta resolución.
- Materiales nanoestructurados y multifuncionales.
- Vidrios activados ópticamente para aplicaciones fotovoltaicas.
- Derivados del carbono y sus aplicaciones.
- Propiedades magnéticas y de transporte en compuestos metálicos de tierras raras y uránidos.
- Difracción elástica e inelástica de neutrones, determinación de estructuras magnéticas. Espectroscopía de muones.
- Propiedades térmicas de materiales: calor específico, transiciones de fase y efectos magnetocalóricos.

- Efectos anómalos en compuestos de Ce. Compuestos de alta correlación electrónica.
- Expansión térmica de materiales metálicos.
- Resistividad eléctrica en vidrios metálicos y nanocristales.
- Emisión acústica en procesos de corrosión bajo tensión.
- Estudio de propagación de microfisuras en materiales metálicos mediante variación de resistencia eléctrica.
- Estudio de dominios en materiales magnéticos; Efecto Barkhausen.
- Propiedades magnéticas y eléctricas de compuestos nanométricos.

### **Proyectos de investigación activos**

Título: "Servicio de Ensayos de Permeabilidad Magnética".

Empresa: SIDENOR INDUSTRIAL, S. L.

Investigador principal: Rodríguez Fernández, Jesús.

Título: "Análisis de alternativas de aprovechamiento de los recursos de la geodiversidad y los recursos energéticos y evaluación de los efectos de los mismos sobre los elementos y procesos del medio natural".

Organismo financiador: SODERCAN, S.A.

Investigador principal: Cendrero Uceda, Antonio.

Título: "Geodiversidad, cambio morfológico global y riesgos naturales".

Investigador principal: Cendrero Uceda, Antonio.

Título: "Concepción de celdas para difracción de neutrones de Altas Presiones con gran volumen de muestra".

Organismo financiador: CRIOVAC ANEVAC S.L.

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando.

Título: "Informes Técnicos Relativos a Difracción de Rayos X".

Organismo financiador: Universidad de la Rioja y C.T. Lurederra.

Investigador principal: Fernández Barquín, Luis.

Título: "Interacciones magnéticas y fenómenos de intercara en materiales nanoestructurados".

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Luis Fernández Barquín.

Título: "Informes Técnicos Relativos a Propiedades Físicas de Materiales".

Investigador principal: Rodríguez Fernández, Jesús.

Título: "Participación de la UC en el Proyecto Europeo Neutronsources", Colaborando con el Consorcio ESS-Bilbao.

Organismo financiador: Fundación TEKNIKER.

Investigador principal: Gomez Sal, José Carlos.

Título: “Nuevos Vidrios Fotoactivos de Alta Transmitancia para aplicaciones fotovoltaicas”.

Organismo financiador: Fundación CIDEMCO.

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando.

Título: “Materia a Alta Presión - MALTA”

Organismo financiador: Universidad Complutense de Madrid

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando.

Título: “Deformaciones estructurales espontáneas en sólidos aislantes y moléculas biológicas”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Moreno Mas, Miguel.

Título: “Engineering Exotic Phenomena at Oxide Interfaces (Oxides)”.

Organismo financiador: Comisión Europea-Université de Liege.

Investigador principal: Junquera Quintana, Francisco Javier.

Título: “Desarrollo de Herramientas para el Seguimiento de Movimientos del Suelo para la Gestión Sostenible del SUDOE (DO-SMS)”.

Organismo financiador: Comisión Europea (Fondos FEDER).

Investigador principal: Remondo Tejerina, Juan.

Título: “Diseño computacional de materiales que presentan biestabilidad magnética a temperatura ambiente”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Moreno Mas, Miguel.

Título: “Transiciones de fase estructurales en sólidos aislantes desde primeros principios: origen microscópico y cambios inducidos en las propiedades magnéticas, eléctricas y ópticas”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Aramburu-Zabala Higuera, José Antonio.

Título: “Simulaciones atómicas de primeros principios: metodología y aplicaciones a sistemas complejos”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Junquera Quintana, Francisco Javier.

Título: “Fuente supercontinua de alta luminosidad para aplicación en nanomateriales y biotecnología”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando.

Título: “Potenciación de infraestructuras y acciones para el laboratorio de nanomateriales de la Universidad de Cantabria”.

Organismo financiador: Ministerio de Economía y Competitividad

Investigador principal: Fernández Barquín, Luis.

Título: “Estudio teórico del origen y manipulación de propiedades exóticas en intercaras entre óxidos”.

Organismo financiador: Universidad de Cantabria.

Investigador principal: Junquera Quintana, Francisco Javier.

Título: “Caracterización óptica de materiales en condiciones extremas”.

Organismo financiador: Universidad de Cantabria.

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando.

Título: “Chromophore-sensitized up – conversion in lanthanide materials”.

Organismo financiador: REA (Research Executive Agency), Beca Marie Curie de Ignacio Hernández Campo, Comisión Europea .

Investigador principal: Rodríguez González, Fernando

## ARTÍCULOS EN REVISTAS DE IMPACTO INTERNACIONAL

Título: “Structural and energetic properties of domains in PbTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> superlattices from first principles”.

Revista: *Physical Review B* 85, 184105 (2012)

Autores: P. Aguado Puente, J. Junquera

Título: “Highly-confined spin-polarized two-dimensional electron gas in SrTiO<sub>3</sub>/SrRuO<sub>3</sub> superlattices”.

Revista: *Physical Review Letters* 108, 107003 (2012)

Autores: Marcos Verissimo-Alves, Pablo García-Fernández, Daniel I. Bilc, Philippe Ghosez and Javier Junquera

Título: “First-principles simulations on the structural and energetic properties of domains in PbTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> superlattices”.

Revista: *Physical Review B* 85, 184105 (2012)

Autores: Pablo Aguado-Puente and Javier Junquera

Título: “Electrostatic coupling and local structural distortions at interfaces in ferroelectric/paraelectric superlattices”.

Revista: *Nano Letters* 12, 2846–2851(2012)

Autores: Pavlo Zubko, Noémi Jecklin, Almudena Torres-Pardo, Pablo Aguado-Puente, Alexandre Gloter, Céline Lichtensteiger, Javier Junquera, Odile Stéphan and Jean-Marc Triscone

Título: “First-principles modeling of the thermoelectric properties of SrTiO<sub>3</sub>/SrRuO<sub>3</sub> superlattices”.

Revista: *Physical Review B* 86, 085305 (2012)



Autores: Pablo García-Fernández, Marcos Verissimo-Alves, Daniel I. Bilc, Philippe Ghosez and Javier Junquera

Título: “Insulators containing  $\text{CuCl}_4\text{X}_2^{2-}$  ( $\text{X} = \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_3$ ) units: Origin of the orthorhombic distortion observed only for  $\text{CuCl}_4(\text{H}_2\text{O})_2^{2-}$ ”.

Revista: *Physical Review B* 85, 0941 10 (2012)

Autores: P. García-Fernández, J.M. García-Lastra, A. Trueba, M.T. Barriuso, J.A. Aramburu, M. Moreno

Título: “Internal electric fields and color shift in  $\text{Cr}^{3+}$  -based gemstones”.

Revista: *Physical Review B* 85, 245118 (2012)

Autores: J.A. Aramburu, P. García-Fernández, J.M. García-Lastra, M.T. Barriuso, M. Moreno

Título: “Pseudo Jahn-Teller origin of nonplanarity and rectangular-ring structure of Tetrafluorocyclobutadiene”.

Revista: *The Journal of Physical Chemistry, A* 2012, 116, 7564-7570

Autores: Y. Liu, I.B. Bersuker, P. García-Fernández, J.E. Boggs

Título: “Benchmark study for the application of density functional theory to the prediction of octahedral tilting in perovskites”.

Revista: *Physical Review B* 86, 144107 (2012)

Autores: P. García Fernández, S. Ghosh, N.J. English, A. Aramburu

Título: “Pseudo Jahn-Teller origin of bending distortions in Renner-Teller molecules and its spectroscopic implications”.

Revista: *International Journal of Quantum Chemistry* 2012, 112, 3025-3032

Autores: P. García Fernández, I.B. Bersuker

Título: “Lattice screening of the polar catastrophe and hidden in-plane polarization in  $\text{KNbO}_3/\text{BaTiO}_3$  interfaces”.

Revista: *Physical Review B* 87, 085305 (2013)

Autores: Pablo García-Fernández, Pablo Aguado-Puente, and Javier Junquera

Título: “Domain walls in a perovskite oxide with two primary structural order parameters: first principles study of  $\text{BiFeO}_3$ ”.

Revista: *Physical Review B* 87, 024102 (2013)

Autores: Oswaldo Diéguez, Pablo Aguado-Puente, Javier Junquera, and Jorge Íñiguez

Título: “ $\text{Cu}^{2+}$  in layered compounds: origin of the compressed geometry in the model system  $\text{K}_2\text{ZnF}_4:\text{Cu}^{2+}$ ”.

Revista: *Inorganic Chemistry* 52, 6923 (2013)

Autores: J.A. Aramburu, J.M. García-Lastra, P. García Fernández, M.T. Barriuso, M. Moreno

Título: “Origin of small barriers in Jahn-Teller systems: quantifying the role of the 3d-4s hybridization in the model system  $\text{NaCl}:\text{Ni}^+$ ”

Revista: *Inorganic Chemistry (aceptado)* (2013)

Autores: M.T. Barriuso, B.Ortiz-Sevilla, J.A. Aramburu, P. García-Fernández, J. M. García-Lastra and M. Moreno

Título: “Compounds Containing Tetragonal  $\text{Cu}^{2+}$  Complexes: Is the  $d_{x^2-y^2}$ - $d_{3z^2-r^2}$  Gap a Direct Reflection of the Distortion? ”.

Revista: *Journal of Physical Chemistry letters* 4, 2385 (2013)

Autores: M.T. Barriuso, B.Ortiz-Sevilla, J.A. Aramburu, P. García-Fernández, J. M. García-Lastra and M. Moreno

Título: “Colour due to  $\text{Cr}^{3+}$  ions in oxides: a study fo the model system  $\text{MgO}:\text{Cr}^{3+}$ ”.

Revista: *J. Phys.: Condens. Matter* 25, 175501 (2013)

Autores: J.A. Aramburu, P. García-Fernández, J.M. García-Lastra, M.T. Barriuso, M. Moreno

Título: “General treatment of the multimode Jahn-Teller effect: study of fullerene cations”.

Revista: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2013, 15, 1252-1259

Autores: H. Ramanantoanina, M. Zlatar, P. García-Fernández, Claude Daul, M. Gruden-Pavlovic

Título: “Pressure coefficients of Raman modes of carbon nanotubes resolved by chirality: Environmental effect on graphene sheet”.

Revista: *Physical Review B* 87, 0854 16 (2013)

Autores: A.J. Ghandour, I.F. Crowe, J.E. Proctor, Y.W. Sun, M.P. Halsall, I. Hernández, A. Sapelkin, J. Dunstan

Título: “Reversibility of the zinc-blende to rock-salt phase transition in cadmium sulfide nanocrystals”.

Revista: *Journal of Applied Physics* 111, 063516 (2012)

Autores: R. Martín-Rodríguez, J. González, R. Valiente, F. Aguado, Santamaría-Pérez, F. Rodríguez

Título: “Effect of pressure on the band gap and the local  $\text{FeO}_6$  environment in  $\text{BiFeO}_3$ ”

Revista: *Physical Review B* 85, 144109 (2012)

Autores: S. Gómez Salces, F. Aguado, F. Rodríguez, R. Valiente, J. González, R. Haumont, J. Kreisel

Título: “Pressure-induced  $\text{Co}^{2+}$  photoluminescence quenching in  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ”.

Revista: *Physical Review B* 86. 125123 (2012)

Autores: L. Nataf, F. Rodríguez, R. Valiente

Título: “Pressure effects on Jahn-Teller distortion in perovskites: The roles of local and bulk compressibilities”.

Revista: *Physical Review B* 85, 100101 (2012)

Autores: F. Aguado, F. Rodríguez, R. Valiente, J.P. Itié, M. Hanfland

Título: “Unraveling the coordination geometry of copper (II) ions in aqueous solution through absorption intensity”.

Revista: *Angewandte Chemie Int. E* 2012. 51, 9335-9338

Autores: S. Gómez Salces, F. Aguado, R. Valiente, F. Rodríguez

Título: "Anomalous high-pressure Jahn-Teller behavior in  $\text{CuWO}_4$ ".

Revista: *Physical Review Letters*, 108, 166402 (2012)

Autores: J. Ruiz-Fuertes, A. Segura, F. Rodríguez, Errandonea, M.N. Sanz-Ortiz

Título: "Multiwalled carbón nanotubes display microtubule biomimetic properties *in vivo*, enhancing, microtube assembly and stabilization".

Revista: *Publicación on line (www.acsnano.org)* Vol 6, Nº 8 – 6614-6625, 7 julio 2012

Autores: L. Rodríguez-Fernández, R. Valiente, J. González, J.C. Villetas, M.L. Fanarraga

Título: "Efficient sensitized emission in Yb(III) pentachlorotropolonate complexes".

Revista: *Chem. Commun.*, 49, 1933-1935 (2013)

Autores: I. Hernández, Y-X. Zheng, M. Motevalli, R.H.C. Tan, W.P. Gillin and P.B. Wyatt

Título: "Importance of Spin-Orbit Interaction for the Electron Spin Relaxation in Organic Semiconductors".

Revista: *Phys. Rev. Lett.* 110, 216602 (2013) [5 pages]

Autores: L. Nuccio, M. Willis, L. Schulz, S. Fratini, F. Messina, M. D'Amico, F. L. Pratt, J. S. Lord, I. McKenzie, M. Loth, B. Purushothaman, J. Anthony, M. Heeney, R. M. Wilson, I. Hernández, M. Cannas, K. Sedlak, T. Kreouzis, W. P. Gillin, C. Bernhard and A. J. Drew

Título: "Complex magnetic states of the heavy fermion compound CeGe".

Revista: *Low Temperature Physics*, vol. 38, nº 7, Julio 2012

Autores: N. Marcano, R.P. Smith, I. Aviani, J.I. Espeso, J.C. Gómez Sal, S.S. Saxena

Título: "Heat capacity and neutron diffraction studies on the frustrated magnetic  $\text{CO}_2(\text{OH})(\text{PO}_4)_{1-x}(\text{AsO}_4)_x$  [ $0 \leq x \leq 1$ ] solid solution".

Revista: *Journal of Solid State Chemistry* 188 (2012) 1-10

Autores: I. de Pedro; J.M. Rojo; J. Rodríguez Fernández; J. Sánchez Marco; M.T. Fernández-Díaz; T. Rojo

Título: "YbNi<sub>2</sub>: A heavy fermión ferromagnet".

Revista: *Solid State Communications* 152 (2012) 1834-1837

Autores: P. Rojas, L. Fernández Barquín, C. Echevarría-Bonet, J. Rodríguez Fernández

Título: "La tecnología cerámica de los niveles IV y III en el yacimiento de Kobaederra (Cortézubi, Bizkaia). Aprovechamiento y modificación de las materias primas".

Revista: *Trabajos de Prehistoria* 69, Nº 1 (enero-junio 2012), pp. 51-64

Autores: M. Cubas, M. García-Heras, Méndez, I. de Pedro, L. Zapata, J.J. Ibáñez, J.E. González

Título: "Magnetic and magnetocaloric properties of martensitic  $\text{Ni}_2\text{Mn}_{1.4}\text{Sn}_{0.6}$  Heuster alloy".

Revista: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 324 (2012) 3519-3523

Autores: V.A. Chernenko, J.M. Barandiarán, J. Rodríguez, Rojas, J. Gutiérrez, P. Lázpita, I. Orue

Título: "Hydrothermal synthesis and physicochemical properties of ruthenium (0) nanoparticles".

Revista: *Journal of Alloys and Compounds* 536S (2012) S437-S440

Autores: A. Dickhtiarenko, A.A. Knainakov, J.R. García, J. Gimeno, I de Pedro, J. Rodríguez

Título: "Lanthanide phosphonates: Synthesis, thermal stability and magnetic characterization".

Revista: *Journal of Alloys and Compounds* 536S (2012) S499-S503

Autores: Z. Amghouz, J.R. García, S. García-Granda, A. Clearfield, J. Rodríguez, I. de Pedro, J.A. Blanco

Título: "Phase stability and magnetic properties of a new cobalt (II) coordination polymer based on 2-carboxyethylphosphonate and 1,10'-phenanthroline".

Revista: *Journal of Alloys and Compounds* 536S (2012) S507-S510

Autores: E. Fernández-Zapico, J. Montejo-Bernardo, R. D'Vries, J.R. García, S. García-Granda, J. Rodríguez-Fernández, I. de Pedro, J.A. Blanco

Título: "Scrutinising magnetic disorder through metastable 3d- and 4f-nanostructures alloys".

Revista: *Journal of Alloys and Compounds* 536S (2012) S259-S264

Autores: L. Fernández-Barquín, Alba Venero, C. Echevarría-Bonet, R. García Calderón, P. Rojas, J. Rodríguez-Carvajal, Q.A. Pankhurst

Título: "Synthesis and characterization of a chromium-piperazinium phosphate with unusual high thermal stability".

Revista: *Journal of Alloys and Compounds* 536S (2012) S485-S487

Autores: A. Espina, S.a. Khainakov, J.R. García, I. de Pedro, J. Rodríguez Fernández, J.A. Blanco

Título: "Interfacial magnetic coupling between Fe nanoparticles in Fe-Ag granular Alloys".

Revista: *Nanotechnology* 23 (2012) 025705 (10 pp)

Autores: J. Alonso, M.I. Fdez-Gubieda, G. Sarmiento, J. Chaboy, R. Boada, A. García Prieto, Hasket, M.A. Laguna-Marco, J.C. Lang, C. Meneghini, I. Fernández-Barquín, T. Neisius, I. Orue

Título: "Intrinsic magnetic relaxation in goethite".

Revista: *Physical Review B* 85, 174437(2012)

Autores: Q.A. Pankhurst, L. Fernández Barquín, J.S. Lord, A. Amato, U. Zimmermann

Título: "Nonlinear susceptibilities as a probe to unambiguously distinguish between canonical and cluster spin glasses".

Revista: *Physical Review B* 86, 094405 (2012)

Autores: Y. Bitla, S.N. Kaul, L.Fernández Barquín

Título: "Spin-glass freezing in a Ni-vermiculite intercalation compound".

Revista: *Journal of Physics: Condensed Matter* 24 (2012) 346001 (10pp)

Autores: C. Marcos, A. Argüelles, S.A. Knainakov, J. Rodríguez, J.A. Blanco

Título: "Transformation behavior of Ni-Mn-Ga in the low-temperature limit".

Revista: *Journal of Physics: Condensed Matter* 24 (2012) 276004 (6pp)

Autores: J.I. Pérez-Landazábal, V. Recarte, V. Sánchez-Alarcos, V.A. Chernenko, J.M. Barandiarán, P. Lázpita, J. Rodríguez, L. Righi

Título: "Synthesis and comparative study of  $\text{Co}(\text{pym})(\text{VO}_3)_2$  and  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O}_2)_2(\text{VO}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ".

Revista: *Dalton Trans.* 2012, 41, 14170-14179

Autores: E.S. Larrea, J.L. Mesa, J.L. Pizarro, R. Fernández de Luis, J. Rodríguez, T. Rojo, M.A. Arriortua

Título: "A new partially deprotonated mixed-valence manganese (II, III) hydroxide-arsenate with electronic conductivity: Magnetic properties of high- and room-temperature sarkinite".

Revista: *Inorganic Chemistry* 2012, 51, 5246-5256

Autores: I. de Pedro, J.M. Rojo, J.Rius, O. Vallcorba, I. Ruiz de Larramendi, J. Rodríguez Fernández, L. Lezama, T. Rojo

Título: "Magnetic properties of  $\text{TbAl}_2$  nanometric alloys".

Revista: *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 12, 1-4, 2012

Autores: P. Rojas, L. Fernández Barquín, C. Echevarría-Bonet, J. Rodríguez Fernández

Título: "Poly (methyl methacrylate) coating of soft magnetic amorphous and crystalline Fe, Co-B Nanoparticles by chemical reduction".

Revista: *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 12, 1843-1851, 2012

Autores: L. Fernández Barquín, A. Yedra Martínez, L. Rodríguez Fernández, P. Rojas, F.J. Murphy, Alba Venero, L. Ruiz González, J. González-Calbet, M.L. Fernández-Gubieda, Q.A. Pankhurst

Título: "Magnetism and magnetocaloric effect of single-crystal  $\text{Er}_5\text{Si}_4$  under pressure".

Revista: *Physical Review B* 85, 024408 (2012)

Autores: N. Marcano, P.a. Algarabel, J. Rodríguez Fernández, C. Magén, L. Morellón, N.K. Singh, L. Schlagel, K.A. Gschneidner Jr., V.K. Pecharsky, M.R. Ibarra

Título: "Magnetovolume and magnetocaloric effects in  $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}$ ".

Revista: *Physical Review B* 86, 184411 (2012)

Autores: P. Álvarez Alonso, P. Gorria, J.A. Blanco, J. Sánchez Marcos, G.J. Cuello, I. Puente Orench, J.a. Rodríguez Velamazán, G. Garbarino, I. de Pedro, J. Rodríguez Fernández, J.L. Sánchez Llamazares

Título: "Neutron powder diffraction investigation in ammonium iron (III) bis (hydrogenphosphate)".

Revista: *Journal of Physics: Conference Series* 340 (2012) 012059

Autores: B.F. Alfonso, C. Piqué, C. Trobajo, J.R. García, E. Kampert, L. Mirebeau, N. Rey, J. Rodríguez Fernández, M.T. Fernández Díaz, J.A. Blanco

Título: "Stable organic radical stacked by *in situ* coordination to rare earth cations in MOF materials".

Revista: *RSC Advances*, 2012, 2, 949-955

Autores: F. Gándara, N. Snejko, A. de Andrés, J. Rodríguez Fernández, J.C. Gómez Sal, E. Gutiérrez Puebla, A. Monge

Título: "A comprehensive approach to investigate Maltese costal landslides".

Revista: *Journal of Coastal Research*, 61, 472-473

Autores: M. Soldati, J. Bonachea, V.M. Bruschi, P. Coratza, S. Devoto, A. González Díez, M. Mantovani, A. Pasuto, Piacentini, J. Remondo, J.A. Schembri

Título: "1:5000 Landslide map of the upper Gállego Valley (central Spanish Pyrenees)".

Revista: *Journal of Maps*, Vol. 8, nº 4, December 2012, 484-491

Autores: J. Guerrero, F. Gutiérrez, Carbonel, J. Bonachea, J.M. García Ruiz, J.P. Galve, P. Lucha

Título: "Analysis of geomorphic systems' response to natural and human drivers in northern Spain: Implications for global geomorphic change".

Revista: *Geomorphology* 196 (2013) 267-279

Autores: V.M. Bruschi, J. Bonachea, J. Remondo, J. Gómez-Arozamena, V. Rivas, G. Méndez, J.M. Naredo, A. Cendrero

Título: El cambio global y el antropoceno; más allá del clima".

Revista: *Revista digital*: [http://ciencias.unizar.es/web/conCIENCIASnumero\\_11.do](http://ciencias.unizar.es/web/conCIENCIASnumero_11.do). Mayo 2013. pp. 84-97. Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza

Autores: V.M. Bruschi, J. Bonachea, J. Remondo, L.M. Forte, M. Hurtado, A. Cendrero

Título: "Visibility analysis and visibility software for the optimisation of wind farm design".

Revista: *Renewable Energy* 60 (2013) 388-401

Autores: C. Manchado, C. Otero, V. Gómez-Jáuregui, R. Arias, V. Bruschi, A. Cendrero

Título: Land management versus natural factors in land instability: some examples in Northern Spain".

Revista: "*Environmental Management*, Vol. 51, Nº 6. Springer. Junio 2013

Autores: V.M. Bruschi, J. Bonachea, J. Remondo, J. Gómez-Arozamena, V. Rivas, M. Barbieri, S. Capocchi, et al.

Título: "Geomorphological research in Spain".

Revista: *Geomorphology* 196 (2013) 1-12

Autores: F. Gutiérrez, A. Harvey, J.M. García-Ruiz, P. Silva, A. Cendrero

Título: "Mapping landslide susceptibility with logistic regression, multiple adaptive regression splines, classification and regression trees, and maximum entropy methods: a comparative study".

Revista: *Landslides* (2013) 10:175-189

Autores: A. Felicísimo, A. Cuartero, J. Remondo, E. Quirós

**COMUNICACIONES EN CONGRESOS**

Autores: J. A. Aramburu, P. Garcia-Fernandez, J. M. García-Lastra, M. T. Barriuso, and M. Moreno

Título: *Color shift and covalency in Cr<sup>3+</sup>-based gemstones.*

Congreso: XVII International Conference on Defects in Insulating Materials (Santa Fe, USA, Julio 2012)

Autores: P. García-Fernández<sup>1</sup>, A. Trueba<sup>1</sup>, J.A. Aramburu<sup>1</sup>, M.T. Barriuso<sup>2</sup> and M. Moreno

Título: *Influence of close vacancies on the properties of transition metal impurities.*

Congreso: XVII International Conference on Defects in Insulating Materials (Santa Fe, USA, Julio 2012)

Autores: S. Morales, P. García-Fernández, M.T. Barriuso, J.A. Aramburu and M. Moreno

Título: *Off-centre Cu<sup>+</sup> and Ag<sup>+</sup> impurities in alkali halides.*

Congreso: XVII International Conference on Defects in Insulating Materials (Santa Fe, USA, Julio 2012)

Autores: P. García-Fernández, J. M. García-Lastra, A. Trueba, M.T. Barriuso, J.A. Aramburu, and M. Moreno

Título: *Insulators containing CuCl<sub>4</sub>X<sub>2</sub><sup>2-</sup> (X = H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>) centers: Why there is an orthorhombic distortion only for CuCl<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub><sup>2-</sup>?*

Congreso: XVII International Conference on Defects in Insulating Materials (Santa Fe, USA, Julio 2012)

Autores: S. Morales, P. García-Fernández, M.T. Barriuso, J.A. Aramburu and M. Moreno

Título: *Ab initio study of the off-centre displacement of closed shell impurities in alkali halides.*

Congreso: XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect (Tsukuba, Japon), Agosto 2012

Autores: J.A. Aramburu, J. M. García-Lastra, P. Garcia-Fernandez, A. Trueba, M.T. Barriuso and M. Moreno

Título: *What is the origin of the different structure of CuCl<sub>4</sub>(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub><sup>2-</sup> and CuCl<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub><sup>2-</sup> units?*

Congreso: XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect (Tsukuba, Japon), Agosto 2012

Autores: M. Moreno, J. M. García-Lastra, A. Trueba, P. Garcia-Fernandez, M.T. Barriuso and J.A. Aramburu

Título: *Puzzling questions in ligand-field theory.*

Congreso: XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect (Tsukuba, Japon), Agosto 2012

Autores: J.M. García-Lastra, P. García-Fernández, J. A. Aramburu, M. T. Barriuso, A. Trueba, and M. Moreno

Título: *Local phase transitions in  $KCl:Mn^{2+}$ : Microscopic origin of the soft modes.*

Congreso: XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect (Tsukuba, Japon), Agosto 2012

Autores: B.Ortiz-Sevilla, M.T. Barriuso, P. Garcia-Fernandez, J.A. Aramburu and M. Moreno

Título:  *$Ni^{2+}$  impurities in cubic lattices: compressed or elongated equilibrium geometry?*

Congreso: XXI International Symposium on the Jahn-Teller Effect (Tsukuba, Japon), Agosto 2012

Autores: J. Junquera, P. García Fernández, M. Verissimo-Alves, I. Bilc, Ph. Ghosez

Título: *Highly confined spin-polarized two-dimensional electron gas in  $SrTiO_3/SrRuO_3$  superlattices.*

Congresos: Fundamental Physics of Ferroelectrics and Related Materials 2012, Argonne, IL USA, 29 de enero- 1 de febrero de 2012 y NanoSpain 2012, Santander, 27 Febrero-1 de marzo de 2012

Autores: P. Aguado-Puente, P. García-Fernández, J. Junquera

Título: *Interplay of coupling between antiferrodistortive, ferroelectric and strain degrees of freedom in monodomain  $PbTiO_3/SrTiO_3$  superlattices.*

Congreso: APS March Meeting, Boston, 27 febrero- 2 marzo de 2012

Autores: J. Junquera

Título: *Oxide interface: what can we learn from first-principles?*

Congreso: TCCM School on Solid State Chemistry, Zaragoza, 11-15 junio 2012

Autores: Javier Junquera Quintana, Pablo Aguado Puente

Título: *Metal-induced gap states in ferroelectric capacitors and its relationship with complex band structures.*

Congresos: APS March Meeting 2013, Baltimore, 18-22 de marzo de 2013

II Workshop on the Physics of Complex Oxides.- 2-5 octubre 2012, Alcudia, Mallorca

Autores: O. Diéguez, P. Aguado Puente, J. Junquera, J. Iñiguez

Título: *Domain walls in a perovskite oxide with two primary structural order parameters: first-principles study of  $BiFeO_3$ .*

Congreso: APS March Meeting 2013, Baltimore, 18-22 de marzo de 2013

Autor: Fernando Rodríguez

Título: *Transiciones de fase inducidas por presión en  $CoF_2$  por medio de difracción y absorción de Rayos X, espectroscopía Raman y absorción óptica.*

Congreso: VI Escuela de Altas Presiones, Oviedo, 20-24 mayo de 2013 (Conferencia invitada)

Autores: L. Nataf, R. Valiente, J. González, F. Rodríguez

Título: *Exciton dynamics in  $1D(CH_3)_4NMnCl_3$  by time-resolved spectroscopy: influence of the Exchange interaction by pressure.*



Congreso: The Joint 6<sup>th</sup> Asian Conference for High Pressure Research and International Forum on High Pressure Sciences (ACHPR-6&IFHPS), 8-12 August, 2012, Beijing, China

Autores: M.N. Sanz-Ortiz, L. Nataf, J.A. Barreda Argüeso, F. Rodríguez, F. Aguado, R. Valiente, J. González, F. Baudelet

Título: *Pressure-induced rutile-to-fluorite-type transition in CoF<sub>2</sub> studied by x-ray absorption, Raman spectroscopy and electronic absorption.*

Congreso: 50<sup>th</sup> EHPRG Meeting, Thessaloniki, Grecia, 16-21 de septiembre de 2012

Autores: J. González, R. Valiente, F. Rodríguez

Título: *Pressure dependence of Raman modes in Graphene Oxide (GO).*

Congreso: 50<sup>th</sup> EHPRG Meeting, Thessaloniki, Grecia, 16-21 de septiembre de 2012

Autor: Fernando Rodríguez

Título: *What could a XtremeC beamline unveil in materials science?*

Congreso: Seminar on Perspectives for Neutron Science in Novel and Extreme Conditions, Zaragoza (Instituto de Ciencias de Materiales de Aragón), 27-31 de mayo de 2012 (Conferencia invitada)

Autores: J. Oribe, J.L. Mesa, J. Rodríguez Fernández, E. Legarra, F. Plazaola, T. Rojo, M.I. Arriortua

Título: *A new organically templated 3D mixed valence (Fe<sup>II</sup>/Fe<sup>III</sup>) Fluoro-phospite.*

Congreso: 7<sup>è</sup>m Rencontre Franco-Espagnole sur la Physique et la Chimie de l'Etat Solide (RFE2012), Paris, Francia, 13-15 junio 2012

Autores: C. Echevarría Bonet, L. Fernández Barquín, P. Rojas, S.N. Kaul, E. Bauer

Título: *Field-dependence of the resistivity minimum in intermediate valence nanometric YbAl<sub>3</sub>.*

Congreso: NanoSpain Conference, Santander, Spain, February 27-March 01, 2012

Autores: U. Chung, J.I. Mesa, E. S. Larrea, J. Rodríguez Fernández

Título: *Li<sub>1.43</sub>[FeII<sub>4.43</sub>FeIII<sub>0.57</sub>(HPO<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]\*1.5H<sub>2</sub>O: A new material with spin glass behavior.*

Congreso: 4<sup>th</sup> International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Material

Autores: C. Echevarría Bonet, P. Rojas, L. Fernández Barquín, J.C. Gómez Sal, S.N. Kaul, B. Coqblin, S.G. Magalhaes, E. Bauer

Título: *Magnetic field dependence of the resistivity minimum of nanosized YbAl<sub>3</sub>.*

Congreso: The 19th International Conference on Magnetism, Bexco, Busan, Corea, July 8-13, 2012

Autores: P. Alvarez, P. Gorria, J.L. Sánchez, J. Sánchez, G. Cuello, I. Puente-Orench, G. Garbarino, I. de Pedro, J. Rodríguez, J. Blanco

Título: *Magneto-volume anomalies and low-temperature inverse magneto-caloric effect in Er<sub>2</sub>F<sub>17</sub>.*

Congreso: The 19th International Conference on Magnetism, Bexco, Busan, Corea, July 8-13, 2012

Autores: Alba, L. Fernández, S.N. Kaul, J. Alonso, M.L. Fernández-Gubieda

Título: *Non-linear susceptibility of nanogranular FeAg films at the verge of superferromagnetism.*

Congreso: The 19th International Conference on Magnetism, Bexco, Busan, Corea, July 8-13, 2012

Autores: A. García-Saiz, I. de Pedro, J.C. Gómez Sal, J.A. Blanco, J. Rodríguez

Título: *Pressure effects on the magnetic properties of Emim[FeCl<sub>4</sub>], a magnetic ionic liquid with antiferromagnetic ordering.*

Congreso: The 19th International Conference on Magnetism, Bexco, Busan, Corea, July 8-13, 2012

Autores: C. Echevarría Bonet, P. Rojas, S.N. Kaul, E. Bauer, L. Fernández Barquín

Título: *Resistivity minimum in intermediate valence YbAl<sub>3</sub>.*

Congreso: SUDOE Workshop on Nanomagnetism and Spintronics, San Sebastian, 22-24 de febrero de 2012

Autores: I. de Pedro, J.M. Rojo, J. Rodríguez-Fernández, M.T. Fernández-Díaz, T. Rojo

Título: *Effect of Ni<sub>2+</sub> (S=1) substitution on the incommensurate antiferromagnetic structure of Co<sub>2</sub> (OH)AsO<sub>4</sub>.*

Congreso: VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Segovia, 24-27 de junio de 2012

Autores: A. García Sáiz, I. de Pedro, J.A. Blanco, M.T. Fernández-Díaz, J. Rodríguez-Fernández

Título: *Magnetic and neutron diffraction studies on Emim[FeCl<sub>4</sub>]. A magnetic ionic liquid with long-range magnetic ordering.*

Congreso: VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Segovia, 24-27 de junio de 2012

Autores: B.F. Alfonso, C. Pique, C. Trobajo, J.R. García, E. Kampert, I. Mirebeau, N. Rey, J. Rodríguez Fernández, M.T. Fernández-Díaz, J.A. Blanco

Título: *Magnetic phase diagram and high-field magnetization measurements in ammonium iron (III) bis (hydrogenphosphate).*

Congreso: VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Segovia, 24-27 de junio de 2012

Autores: P. Rojas, J. Sánchez-Marcos, J. Rodríguez-Fernández

Título: *Succesive magnetic transitions in TbNiAl<sub>2</sub> studied by neutrón diffraction.*

Congreso: VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Segovia, 24-27 de junio de 2012

Autores: L. Fernández Barquín, Q.A. Pankhurst, J. Rodríguez-Carvajal, B. Farago, J.S. Lord, A. Amato, U. Zimmermann

Título: *Investigation of nanoclustered magnetic materials with neutrón-based spectroscopies.*  
Congreso: VI Reunión de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN), Segovia, 24-27 de junio de 2012

Autores: L.M. Forte, J. Remondo y A. Cendrero

Título: *Trends in the intensity of geomorphic processes during the 20th century: implications for the starting point of the anthropocene.*

Congreso: Scientific Symposium in honour of Prof. Antonio Cendrero, Santander, 21 de septiembre de 2012

Autores: J. Bonachea, J. Remondo, V.M. Bruschi, J.R. Díaz de Terán, A. González-Díez, A. Cendrero

Título: *Evaluación de modelos de riesgo por deslizamientos a partir de eventos recientes.*

Congreso: XII Reunión Nacional de Geomorfología, Santander, 17-20 de septiembre de 2012

Autores: G. Fernández-Maroto, A. González-Díez, M. Doughty, J. Remondo, P. Martínez-Cedrún, J.R. Díaz de Terán, V. Bruschi, J. Bonachea, A. Cendrero

Título: *Influencia del macizo rocoso en la génesis de los futuros desprendimientos del área de Ajanedo-Merilla, Cantabria.*

Congreso: XII Reunión Nacional de Geomorfología, Santander, 17-20 de septiembre de 2012

Autores: A. González Díez, G. Fernández-Maroto, M. Doughty, P. Martínez-Cedrún, J. Remondo, V.M. Bruschi, J. Bonachea, J.R. Díaz de Terán, A. Cendrero

Título: *La influencia de la tubificación en la génesis de deslizamientos originados por lluvias intensas.*

Congreso: XII Reunión Nacional de Geomorfología, Santander, 17-20 de septiembre de 2012

Autores: M. Hurtado, L.M. Forte, V.M. Bruschi, J. Bonachea, V. Rivas, J. Gómez Arozamena, M. Dantas Ferreira, J. Remondo, A. González, J.R. Díaz de Terán, L. Salas, A. Cendrero

Título: *The geomorphic dimension of global change. Risks and opportunities.*

Congreso: XII Reunión Nacional de Geomorfología, Santander, 17-20 de septiembre de 2012

## **CAPÍTULOS DE LIBROS**

Autores: P. García-Fernández, A. Trueba, M.T. Barriuso, J.A. Aramburu, M. Moreno

Título: *Vibronic Interactions and the Jahn-Teller Effect: Theory and Applications.*

Capítulo: *Dynamic and static Jahn-Teller effect in impurities: determination of the Tunneling Splitting.*

Editorial: M. Atanasov et al. (eds). Springer-Verlag: Heidelberg, 2012: p. 105

Autores: J. Junquera, P. García Fernández, M. Verissimo-Alves, I. Bilc, Ph. Ghosez

Título: Technical Digest of Frontiers in Electronic Materials.

Capítulo: *Highly confined spin-polarized two-dimensional electron gas in SrTiO<sub>3</sub>/SrRuO<sub>3</sub> superlattices.*

Editorial: J. Heber, Schlom, Y. Tokura, R. Waser, M. Wuttig, Wiley-Vch

Autores: P. García Fernández, P. Aguado-Puente, J. Junquera

Título: Technical Digest of Frontiers in Electronic Materials.

Capítulo: *Strain tuning of ferroelectric-antiferrodistortive coupling in PbTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> superlattices.*

Editorial: J. Heber, Schlom, Y. Tokura, R. Waser, M. Wuttig, Wiley-Vch

Autores: González-Díez A, Fernández-Maroto G, Doughty MW, Remondo J, Bruschi VM, Bonachea J, Díaz de Terán JR, Martínez-Cedrún P, Rivas V, Flor G, Serrano E, Gutiérrez F, Benito G, Desir G, López J, Romero MA, Batalla R, Gracia FJ, Flor-Blanco G, Garzón G, Cardenal J, Vilaplana JM, Corominas J, Díaz-Martínez E, Jiménez-Sánchez M, Guerra JC (eds.)

Título: Actas de la XII Reunión Nacional de Geomorfología.

Capítulo: *Avances de la geomorfología en España 2010-2012.*

Editorial: Publican, Santander. 2012

Autores: A. González Díez; G. Fernández Maroto, Mathew Doughty; J. Bonachea Pico, Juan Remondo Tejerina y J.R. Díaz de Terán

Título: Guía de Excursiones de Campo.

Capítulo: *Excursión científica a las cuencas de los ríos Pas y Miera.*

Editorial: A. González-Díez; G. Flor Blanco; J.R. Díaz de Terán. Santander 2012

Autores: M.L. Fernández-Gubieda, Javier Alonso Masa y Luis Fernández Barquín

Título: Nanoparticles Featuring Electromagnetic Properties: From Science to Engineering.

Capítulo: *Collective magnetic behaviors in interacting magnetic nanoparticles.*

Editores: A. Chiolerio y P. Allia, Kerala, India, 2012

## CONFERENCIAS INVITADAS

Autor: Javier Junquera y Pablo García Fernández

Título: *Confining electrons in two dimensiones: First-principles simulations of SrTiO<sub>3</sub>/SrRuO<sub>3</sub> superlattices.*

Fecha: 24 de enero de 2013

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): Max Planck Institute for Solid State Research.- Stuttgart, Alemania

Autor: Javier Junquera Quintana

Título: *First-principles modeling of titanate/ruthenate superlattices.*

Fecha: 18 de marzo de 2013

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): American Physical Society, Baltimore, USA

Autor: Javier Junquera Quintana

Título: *Metal induced gap states in ferroelectric capacitors and its relationship with complex band structures.*

Fecha: 17 de septiembre de 2012

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad):: Unité Mixte de Physique CNRS/THALES, Palaiseau, France

Autor: Fernando Rodríguez González

Título: *What could a XtremeC beamline unveil in materials science?*

Fecha: 27 – 31 de mayo de 2012

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): Advanced Seminar on "Perspectives for Neutron Science in Novel & Extreme conditions", Universidad de Zaragoza-ICMA, Spain

Autor: Fernando Rodríguez González (Conferencia plenaria)

Título: *Exciton dynamics in 1D (CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>NMnCl<sub>3</sub> by time-resolved spectroscopy: influence of the exchange interaction by pressure.*

Fecha: 8-12 de agosto de 2012.

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): The 6th Asian Conference on High Pressure Research (ACHPR 6) & International Forum on High Pressure Sciences (IFHPS): ACHPR6 & IFHPS Program, Beijing (China)

Autor: Fernando Rodríguez González

Título: *UNIVERSITY OF CANTABRIA (Colaboración)*

Fecha: 14 de agosto de 2012.

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): Universidad de Sichuan, Chengdu (China)

Autor: Fernando Rodríguez González

Título: *Transiciones de fase inducidas por presión en CoF<sub>2</sub>: Difracción/Absorción de Rayos x, Espectroscopia Raman y Absorción Óptica .*

Centro de Investigación anfitrión (o Universidad): VI Escuela de Alta Presión, Universidad de Oviedo, Mayo 2013

## TESIS DOCTORALES

Título: *Espectroscopía de metales de transición en sistemas estructuralmente complejos. Aplicación a vidrios fotoactivos y materiales multiferroicos.*

Autor: Susana Gómez Salces

Director: Fernando Rodríguez González

## EXPERIMENTOS realizados en grandes instalaciones europeas bajo criterios de asignación de tiempos por Comités Externos

Manuel de Pedro del Valle, Abel García

Título: *Neutron powder diffraction study in the first example of MIL with a long range magnetic ordering, [Emim][FeCl<sub>4</sub>]. Neutron diffraction study of a magnetic Ionic Liquid Crystal: [Choline][FeCl<sub>4</sub>]*

Centro: Institut Laue Langevin, Grenoble, Francia

Duración: 22-26 de febrero de 2012

Manuel de Pedro del Valle, Abel García

Título: *Phase transition and magnetic structure study in a magnetic ionic liquid with a long-range magnetic ordering, [C<sub>2</sub>mim][FeCl<sub>4</sub>] and deuterated phases.*

Centro: LLB (Paris, Francia)

Duración: 22-25 de abril de 2012

Manuel de Pedro del Valle, Abel García

Título: *Investigation of the long range magnetic ordering in a magnetic Ionic Liquid Crystal: [Choline][FeCl<sub>4</sub>]*

Centro: Paul Scherrer Institut, Villigen, Suiza

Duración: 9-15 de junio de 2012

Manuel de Pedro del Valle, Abel García

Título: *In search of the origin of the long-range magnetic ordering of Magnetic Ionic Liquids based on imidazolium cation and tetrachloroferrate anion.*

Centro: Paul Scherrer Institut, Villigen, Suiza

Duración: 7-8 de junio y 4 -8 de julio de 2013

Manuel de Pedro del Valle, Abel García

Título: *Crystal phase transition and magnetic structure characterization of the multifunctional [(C<sub>n</sub>H<sub>2n+1</sub>)<sub>4</sub>N][FeCl<sub>4</sub>] (n=1-2) compounds.*

Centro: Paul Scherrer Institut, Villigen, Suiza

Duración: 17-29 de julio de 2013

Fernando Aguado Menéndez, Fernando Rodríguez González y José Antonio Barreda

*Pressure-induced structural-phase transition in [(C<sub>n</sub>H<sub>2n+1</sub>)<sub>4</sub>N]FeX<sub>4</sub> (n=1,4; X: Cl,Br) associated with changes of Fe coordination. Opto-structural correlations*

ALBA, Barcelona.- ID2012010239 of Beamline 04-MSPD

27 de junio a 1 de julio de 2012

Rafael Valiente Barroso, Fernando Rodríguez González y José Antonio Barreda, Lucie Nataf

Título: *High pressure EXAFS study of the Mn<sub>2+</sub> ions in [(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>N]<sub>2</sub>MnCl<sub>4</sub> and [(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>N]<sub>2</sub>MnBr<sub>4</sub>*

Centro: SOLEIL, París, Francia.- Proposal 20120531 on ODE

Fecha: 27 de noviembre- 4 de diciembre de 2012

## ESTANCIAS EN EL EXTRANJERO

Manuel de Pedro del Valle

Tema: *"Síntesis de líquidos iónicos magnéticos"*

Fecha: Agosto-Septiembre 2012

Lugar: Universidad de Rio Grande do Sul, Brasil

Ignacio Hernández Campo

Tema: Participación, como Profesor, en el *"International Immersion Programme"*

Fecha: 1-10 julio de 2013

Lugar: Universidad de Sichuan, Chengdu, China

## CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN EL DEPARTAMENTO

26 de octubre de 2012

*"Magnetic and neutron powder diffraction study in Magnetic Ionic Liquids with a long-range magnetic ordering, [Emim][FeCl<sub>4</sub>] and [Dimim][FeCl<sub>4</sub>]"*

Dr. Manuel de Pedro (Magnetismo de la Materia) - Departamento CITIMAC - Universidad de Cantabria

19 de octubre de 2012

*"First Principles Simulation on PbTiO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> Superlattices"*

Prof. Javier Junquera (Física Teórica de la Materia Condensada) - Departamento CITIMAC - Universidad de Cantabria

5 de octubre de 2012

*"Exciton dynamics in 1D (CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>NMnCl<sub>3</sub> by time-resolved spectroscopy: influence of the exchange interaction at high pressure"*

Prof. Fernando Rodríguez (Altas Presiones y Espectroscopía) - Departamento CITIMAC - Universidad de Cantabria)

9 de noviembre de 2012

*"Pressure and temperature dependence of Co<sup>2+</sup> - doped ZnO. A spectroscopic study"*

Carlos Renero (Altas Presiones y Espectroscopía) - Departamento de Física Aplicada - Universidad de Cantabria)

15 de noviembre de 2012

*"General approach to analyze the multimode JT distortion"*

Dr. Matija Zlatar - University of Belgrade (Yugoslavia)

22 de febrero de 2013

*"Predicción de imanes moleculares con anisotropía magnética gigante utilizando simulaciones de primeros principios"*

Dr. P. García Fernández - Física Teórica de la Materia Condensada - Universidad de Cantabria

8 de marzo de 2013

*"Materiales "magnetodieléctricos": una visión desde la óptica física."*

Dr. F. Moreno - Departamento de Física Aplicada - Universidad de Cantabria

26 de abril de 2013

*"Proceso de imanación en micro y nanohilos magnéticos"*

Dr. Manuel Vázquez Villalabeitia - Investigador del CSIC-ICMM

22 de marzo de 2013

*"Agregados de hierro en nanotubos de carbono. Magnetismo y propiedades estructurales"*

Dr. A. Mañanes - Departamento de Física Moderna - Universidad de Cantabria

24 de mayo de 2013

*"Magnetic nanoparticles for novel applications"*

Dr. George Hadjipanayis - University of Delaware (EEUU)

7 de junio de 2013

*"Relevancia de la microscopía de haz de iones y electrones focalizados para la fabricación y caracterización de nanomateriales funcionales"*

Dr. M.R. Ibarra - Instituto de Nanotecnología - Universidad de Zaragoza

19 de junio de 2013

*"Magnetic relaxation in small nanoparticle clusters"*

Dr. O.Hovorka - Universidad de York, Reino Unido

5 de julio de 2013

*"Átomos ultrafríos para ciencia de simulación cuántica"*

Dra. L. Torralbo - Universidad de Amsterdam, Reino Unido

## ACTIVIDADES CIENTÍFICAS RELEVANTES

- El grupo de Geodinámica Externa organizó el Congreso: XII Reunión Nacional de Geomorfología, que se celebró en Santander del 17 al 20 de septiembre de 2012.
- El grupo de investigación de Geodinámica Externa organizó el *"Scientific Symposium in honour of Prof. Antonio Cendrero"*, que se celebró en Santander el 21 de septiembre de 2012.
- El grupo de investigación de Geodinámica Externa participó activamente en la gestión del desastre natural (argayo) acaecido en la comarca de Los Llanos, Cantabria, durante los meses de junio y julio de 2013.
- Un equipo de investigación constituido por miembros del *Grupo de Altas Presiones y Espectroscopía (APYE)* ha llevado a cabo el primer experimento oficial desarrollado en la línea de microfoco de rayos X (MSPD) del sincrotrón ALBA. El proyecto de investigación, titulado "Pressure-induced structural-phase transitions in  $[(C_nH_{2n+1})_4N]FeX_4$  ( $n=1,4$ ; X: Cl,Br) associated with changes of Fe coordination. Opto-structural correlations", fue seleccionado para su financiación tras un proceso competitivo internacional de entre todas las propuestas presentadas. En dicho proyecto, desarrollado entre los días 27 de Junio y 1 de Julio de 2013 en la recién inaugurada línea MSPD, se realizaron diversos experimentos de difracción de rayos x en materiales mixtos orgánicos/inorgánicos sometidos a condiciones extremas de



alta presión y contó con la participación de los investigadores Fernando Rodríguez González, Fernando Aguado Menéndez y José Antonio Barreda Argüeso del citado grupo de investigación.-

- El grupo de Altas Presiones participó en la divulgación "Poster Marie Curie" para la Semana de la Ciencia de la Facultad de Ciencias, con información sobre los programas PEOPLE del 7º Programa Marco de la Unión Europea.

## REPRESENTACIÓN Y RECONOCIMIENTOS CIENTÍFICOS

- El profesor A. Cendrero es *Académico Numerario de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*.

- El profesor A. Cendrero es *Miembro del Comité Científico Asesor del Observatorio de la Sostenibilidad en España (OSE)*.

- El profesor A. Cendrero es *miembro del Editorial Board de CATENA y revisor de Earth Surface Processes and Landforms, Geomorphology, Disasters Journal, Journal of Soils and Sediments, Bolletino della Società Geologica Italiana, Journal of Environmental Management*.

- El profesor A. Cendrero es *Evaluador para los programas nacionales de I+D+i de Italia, Portugal y Argentina*.

- El profesor J.R. Díaz de Terán es miembro de la *Sociedad Española de Geomorfología* y del *Centre Européen sur les Risques Géomorphologiques (CERG)* perteneciente al Consejo de Europa, actuando como revisor para la revista *Cuaternario y Geomorfología*.

- El profesor Alberto González Díez es miembro y Presidente de la *Sociedad Española de Geomorfología*, *asimismo es miembro de la Sociedad Española de Teledetección* y del *Centre Européen sur les Risques Géomorphologiques (CERG)* perteneciente al Consejo de Europa, actuando como revisor para numerosas revistas científicas tanto nacionales (*Cuaternario y Geomorfología, Boletín Geológico y Minero*) como internacionales (*Geomorphology*).

- El profesor Juan Remondo Tejerina es miembro de la *Sociedad Española de Geomorfología, Sociedad Geológica de España* y del *Centre Européen sur les Risques Géomorphologiques (CERG)* perteneciente al Consejo de Europa. Es revisor habitual de las revistas *Geomorphology, Natural Hazards, Earth Surface Processes and Landforms, Environmental Earth Sciences, Advances in Space Research, Natural Hazards and Earth System Sciences, Geografía Física e Dinámica Cuaternaria*. Es editor de la revista "*Cuaternario y Geomorfología*".

- El Profesor L. Fernández Barquín es revisor de las revistas *Physical review Letters, Physica Review B, J. Phys.: Condens. Matt., J. Phys. D: Appl. Phys., Appl Phys. Lett., J. Magn. Mgn. Mat.* y ocasionalmente otras.

- El Profesor Luis Fernández Barquín es evaluador en la Comisión de Evaluación de Proyectos del Ministerio de Economía y Competitividad, en el área temática de Ciencias de Materiales

- El Profesor Luis Fernández Barquín es evaluador de proyectos de la Agencia FONCYT de Argentina y de la agencia FONDECYT de Chile, en el área de Materiales.

- El Profesor Luis Fernández Barquín es evaluador de proyectos en la ANEP.

- El profesor Fernando Rodríguez es miembro del *International Advisory Committee (European High Pressure Research Group Meeting, EHPRG'50)*.-Universidad Aristóteles, Tesalónica, Grecia.- Septiembre de 2012

- El profesor Fernando Rodríguez es miembro del International Advisory Committee (AIRAPT) Conferencia AIRAPT-24 & APS-SCCM, University of Washington, Seattle (EEUU).- Julio de 2013
- El profesor Fernando Rodríguez González ha realizado tareas de censor en las revistas *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Physical Review B*, *Physical Review Letters*, e *Inorganic Chemistry* así como de diversas Actas de Congresos.
- Ignacio Hernández Campo es "Visiting Researcher" de la Queen Mary University of London
- El Dr. Ignacio Hernández ha realizado tareas de revisión en las revistas *Inorganic Chemistry*, *Journal of Materials Chemistry B* y *C*, *Journal of Physical Chemistry A* y *B*, *Physica Status Solidi b* y *Materials Research Bulletin*
- El Dr. Ignacio Hernández ha actuado como Responsable del Ciclo de Seminarios en Física de la Materia Condensada, Materiales y Nanotecnología impartidas por el Departamento a lo largo del curso académico.
- El Prof. Miguel Moreno es el único miembro español en el *Comité Internacional* de la "International Conference on Defects in Insulating Materials" y de la "European Conference on Defects in Insulating Materials"
- El Prof. Javier Junquera es uno de los miembros del panel de Coordinación de la Red Española de e-Ciencia, dependiente del Ministerio de Ciencia e Innovación.
- El Prof. Javier Junquera es uno de los miembros del panel internacional "Coordination Committee for N-scaling in the European network Psi-k".
- El Prof. Javier Junquera ha actuado como revisor de proyectos del Departamento de Energía de los Estados Unidos de América.
- El Prof. Javier Junquera ha actuado como revisor externo en la promoción de plazas de Tenior Track a Tenior en las Universidades de Stony Brook (Nueva York, EEUU) y University of South Florida (Florida, EEUU).
- El profesor Javier Junquera ha realizado tareas de revisor en las revistas *Physical Review Letters*, *Physical Review B*, *Europhysic Letters*, *Europhysic Journal B*, *Advanced Materials*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Journal of Applied Physics*, y *Material Science in Semiconductor Processing*.
- El profesor Javier Junquera participó en el tribunal de la tesis de Otto González-Vázquez titulada "First-principles investigation of BiFeO<sub>3</sub> and related multiferroic materials", para acceder al título de Doctor en Física en la Universidad Autónoma de Barcelona (Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMA-B-CISC). La tesis se defendió el 6 de Julio de 2012.
- El profesor Jose A. Aramburu-Zabala ha realizado tareas de revisor de las revistas *Reviews of Modern Physics*, *Crystal Engineering Communications*, *Physical Review Letters*, *Chem.Phys.Chem*, *Physical Review B*, *Physica Status Solidi B*, *Computational Materials Science*, *Zeitschrift für Naturforschung A* y *Annalen der Physik*.
- El profesor Jose A. Aramburu-Zabala ha actuado como revisor externo del Irish Research Council (Agencia de Investigación de Irlanda).