

AGENCIA ESTATAL DE INVESTIGACIÓN - Convocatoria 2018
Acciones de dinamización «Redes de Investigación»

AVISO IMPORTANTE - La memoria no podrá exceder de 10 páginas. Para rellenar correctamente esta memoria, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.

COORDINADOR DE LA RED (Nombre y apellidos): Francisco Javier Manjón Herrera

TÍTULO DE LA PROPUESTA: MALTA-Consolider Team

1. PROPUESTA CIENTÍFICA

La presión da forma a las estrellas y a los planetas, a los continentes y a los océanos, e influye profundamente en nuestras vidas. En realidad, el planeta Tierra bien podría considerarse un laboratorio en el que se producen condiciones extremas de todo tipo por la combinación de altas presiones, altas temperaturas y procesos físico-químicos, geológicos y biológicos. Por eso uno de los objetivos fundamentales de la investigación en altas presiones es el de poder reproducir procesos como los que tienen lugar en el interior de la Tierra y de otros objetos planetarios (transformaciones de fase, reacciones químicas, formación de minerales e hidrocarburos, y actividad microbiana, entre otros), así como comprender sus implicaciones físicas, químicas, geológicas y biológicas. Sin embargo, el actual desarrollo de esta disciplina científico-tecnológica ha trascendido el esclarecimiento de los procesos naturales propio de las ciencias de la Tierra y ha permitido desarrollar novedosas aplicaciones tecnológicas que van desde la ciencia de materiales hasta la tecnología de alimentos y las ciencias de la vida.



Estas son algunas de las razones por las que el estudio del comportamiento de la materia sometida a alta presión, junto con otras condiciones extremas, se considera entre las líneas de investigación multidisciplinares que son prioritarias a nivel mundial y que han suscitado la creación de equipos de investigación específicos en diversos continentes. Entre ellos se pueden destacar, la división **Matter at Extremes** del sincrotrón ESRF en Europa (<https://www.esrf.eu/UsersAndScience/Experiments/MEx>), la división **HPCAT** del sincrotrón APS en EEUU (<https://hpcat.aps.anl.gov/>) y la división **HPSTAR** en China (<http://hpstar.ac.cn>).

Hace poco más de una década, la comunidad científica española dedicada al estudio de la materia sometida a altas presiones tenía poca interacción. Estaba diseminada en diferentes grupos de investigación y -salvo colaboraciones esporádicas- la mayoría de estos grupos mantenían colaboraciones activas sólo con instituciones extranjeras. La convocatoria CONSOLIDER-Ingenio 2010 del MICINN nos ofreció la oportunidad de fomentar las interacciones científicas y organizativas a nivel estatal, formando la red **MALTA-Consolider Team**, donde nos dimos cuenta que el éxito de la alta presión española requería de una colaboración a largo plazo entre los diferentes grupos de investigación existentes.

En 2007, los once grupos que nos involucramos en el proyecto Materia a Alta Presión (MALTA), CSD-2007-00045 planteamos un proyecto multidisciplinar que cubría la mayoría de los temas punteros en la ciencia de altas presiones -una situación atípica habida cuenta de los pocos científicos dedicados a la alta presión en nuestro país-. La concesión del proyecto supuso un enorme salto cualitativo en la presencia de la alta presión española a nivel

internacional y sus miembros constituyen una red, conocida internacionalmente como **MALTA-Consolider Team**, que se ha consolidado y evolucionado hasta convertirse en un referente a nivel mundial en la investigación a altas presiones y de los materiales sometidos a condiciones extremas, despertando el interés de numerosos grupos nacionales e internacionales. La red **MALTA-Consolider Team** se financió entre 2015 y 2017 mediante el proyecto “Materia a Alta Presión: MALTA-Consolider Team, MAT2015-71070-REDC” que permitió el mantenimiento de la página web y la financiación de la Escuela de Altas Presiones (descrita más adelante) dentro de los Cursos de Verano de El Escorial del año 2017. La presente convocatoria de “Redes de Investigación” nos da la oportunidad de ampliar el número de grupos que conforman la red **MALTA-Consolider Team**, tal como venían reclamando algunos grupos de nuestros más cercanos colaboradores, y de consolidar y ampliar las actuaciones de la red. A lo largo de esta memoria discutimos brevemente los aspectos más singulares y relevantes por los que consideramos que la red **MALTA-Consolider Team** debe continuar con su labor en los años 2020 y 2021.

En los once años transcurridos desde el inicio del proyecto MALTA la producción del **MALTA-Consolider Team** ha alcanzado los 570 artículos (con más de 8600 citas recogidas) y otros documentos científicos (más de la mitad recogidos en el JCR), se han desarrollado y defendido más de 50 Tesis Doctorales y se han contratado 20 nuevos investigadores a cargo de los fondos CONSOLIDER. Fruto de la sinergia entre los diferentes grupos fue la publicación en CRC Press del primer compendio multidisciplinar sobre altas presiones escrito exclusivamente por investigadores españoles (ISBN 9781498736220). El retorno económico ha sido también indiscutible: se han firmado 15 contratos con empresas, se han obtenido cerca de 90 proyectos de investigación con otras entidades españolas diferentes al MINECO, se ha participado en 7 proyectos FP7 de la UE, se han elaborado 7 patentes y se consiguió un contrato de Técnico de Valorización Tecnológica del MICINN.

La red tiene una alta visibilidad y notoriedad gracias a la difusión de la red a nivel internacional en ponencias y congresos nacionales e internacionales; al desarrollo de su página web (www.malta-consolider.com), donde se vienen recogiendo todas las actividades de la red y los principales hitos científicos alcanzados por cada uno de sus grupos/miembros; y a la creación de la Escuela de Altas Presiones (EAP) bautizada internacionalmente como Summer Under Pressure School (SUPS), que es un modelo de formación de jóvenes investigadores a nivel mundial. En este sentido es de destacar que la red **MALTA-Consolider Team** organizó en 2015 el congreso internacional Joint 25-AIRAPT and 53-EHPRG en Madrid que atrajo a más de 300 investigadores a nuestro país y en 2020 organizará el congreso internacional 58-EHPRG en Tenerife que espera atraer a un número similar de investigadores.

Con respecto al programa educativo de la red **MALTA-Consolider Team**, en el han participado jóvenes científicos en todos los niveles de sus carreras. El mayor exponente son las ocho ediciones de la EAP/SUPS, iniciada en 2002 y por donde han pasado más de 200 alumnos y 70 profesores. Un dato interesante es que un tercio de los profesores que han participado en las escuelas más recientes, incluyendo la que se celebrará en 2019, fueron antiguos egresados de los grupos de la red y que se han incorporado a las escuelas como científicos senior. Como medida del éxito de nuestro plan de formación, queremos resaltar que dos de nuestras egresadas fueron galardonadas en 2011 y 2013 con el premio para jóvenes científicos que concede anualmente el grupo europeo de altas presiones EHPRG (<http://www.ehprg.org/award.php>).

En la siguiente figura se muestra la actividad de la página web entre enero de 2008 y marzo de 2019, habiéndose recibido unas 21.000 visitas (destacando 60% de España, 5% de EEUU, 5% de Reino Unido, 2% China y 2% Francia). (Nota: no se han incluido a propósito las visitas vinculadas a la organización de las conferencias internacionales como la conferencia Joint 25-AIRAPT and 53-EHPRG, organizada en





Madrid en 2015 por Valentín García Baonza, y en la que la red MALTA tuvo un papel especial al igual que la tendrá en la conferencia internacional 58-EHPRG de 2020 en Tenerife organizada por Alfonso Muñoz González).

Finalmente es de destacar que el fuerte vínculo establecido entre los diferentes grupos gracias al proyecto MALTA ha permitido configurar equipos de investigación estables dentro de la red **MALTA-Consolider Team**. La mayoría de los once grupos que participaron en MALTA han obtenido financiación continuada en las sucesivas convocatorias del Plan Nacional y disfrutaron de proyectos coordinados, lo que da una idea del grado de convergencia adquirido por los diferentes grupos en cuanto a sus intereses y objetivos científicos. En resumen, todos los datos aquí expuestos avalan la relevancia científica de nuestra red de investigación y nos animan a seguir apostando por ella.

Las principales acciones que se plantea realizar con el presente proyecto para consolidar la red **MALTA-Consolider Team** de cara a promover la comunicación entre los grupos, impulsar las actividades de I+D+I, entre ellas las posibles acciones conjuntas futuras, y afrontar los retos inicialmente planteados en el proyecto MALTA son: i) el mantenimiento de la página web de la red y su servidor, elemento principal de comunicación de ésta; ii) la organización de una reunión anual de la red (en fechas diferentes de las de los congresos especializados en nuestra área) y iii) la financiación de la EAP/SUPS del año 2021 a celebrar en Valencia.

Los estudios que los grupos de la red realizamos gracias a nuestros proyectos de investigación implican la medida e interpretación de propiedades fundamentales de la materia, incluyendo estudios estructurales y diversas espectroscopías, ecuación de estado, transiciones de fase, síntesis de nuevos materiales, reactividad química, actividad microbiana, etc. en condiciones de alta presión, combinadas habitualmente con otras variables físico-químicas.

Es de destacar que los grupos de la red en sus respectivos proyectos de investigación tienen como objetivo el desarrollo de nuevos instrumentos de medida, sensores, y técnicas de caracterización a altas presiones, así como la implementación de nuevas estrategias computacionales y metodologías teóricas. Además, puesto que parte de nuestro interés está precisamente ligado a sus aplicaciones tecnológicas, un objetivo fundamental es diseñar y sintetizar nuevos materiales con interesantes propiedades mediante la combinación de altas presiones y temperaturas. Es por ello que queremos indicar que una apuesta decidida a medio-largo plazo por la tecnología a alta presión requiere la consolidación y expansión de esta disciplina a nivel científico y socio-cultural, por lo que la red pretende continuar con su programa de formación de científicos, divulgación de la investigación a altas presiones de forma prolongada y sostenida.

Los objetivos científicos de la red **MALTA-Consolider Team** pueden agruparse en tres categorías genéricas y los subobjetivos específicos en cada categoría se pueden consultar y ampliar en la página web de la red (www.malta-consolider.com):

- **Sistemas relacionados con el agua y la vida.**
- **Sistemas moleculares: propiedades físicas y reactividad química.**
- **Estructura, estabilidad y reactividad de materiales.**

En resumen, el objetivo de la presente solicitud es solicitar presupuesto para mantener activa y desarrollar más si cabe esta red de gran presente y futuro. Es de destacar que desde 2008, nuestra red se ha consolidado y ha evolucionado hasta convertirse en un referente a nivel mundial en la investigación de materiales sometidos a condiciones extremas de presión y temperatura. Tal es así, que la nueva red pretende ampliar su cobertura a más grupos españoles -de hecho hemos completado el límite de 15 grupos permitidos- que realizan estudios de materiales en condiciones extremas y que han sido atraídos por las capacidades y sinergias que se desarrollan en nuestra red.

PALABRAS CLAVE: MATERIALES, ALTA PRESIÓN, CONDICIONES EXTREMAS |

2. DEFINICIÓN DE LOS GRUPOS DE INVESTIGACIÓN DE LA RED

El carácter multidisciplinar de las altas presiones abarca aspectos experimentales y teóricos, y requiere el concurso de investigadores expertos en diferentes áreas científico-tecnológicas para avanzar en el entendimiento de cómo se comporta la materia a alta presión; esta circunstancia marcó las pautas de cómo se configuró la red **MALTA-Consolider Team** y se mantiene once años después.

Atendiendo a las vinculaciones de los miembros de los grupos a sus respectivas instituciones, se utilizarán los siguientes acrónimos: Catedrático/a de Universidad (CU), Profesor/a de Investigación (PI), Titular de Universidad (TU), Científico/a Titular (CT), Profesor/a Contratado Doctor (COD), Profesor Ayudante doctor (AYD), Profesor/a Colaborador (COL), Profesor/a Adjunto/a (PA), Profesor/a Laboral (PL), Científico de línea (CIL), Investigador/a “Juan de la Cierva”(JdC), Investigador/a “Ramón y Cajal” (RyC), Investigador/a Marie Skłodowska-Curie (MSC), Investigador/a postdoctoral (POS), Investigador/a predoctoral (PRE). Se indica también aquellos representantes que han sido investigadores principales (IPs) de proyectos.

Los grupos de investigación integrados en la red **MALTA- Consolider Team** son:

1) **Coordinador: Francisco Javier Manjón Herrera (CU)**

Universitat Politècnica de València (UPV)

Grupo de Investigación de Materiales en condiciones extremas (EXTREMAT)

MAT2016-75586-C4-2-P (IP)

Objetivos del grupo: Síntesis y estudio experimental y teórico de las propiedades estructurales, vibracionales, elásticas, ópticas y eléctricas de materiales y nanomateriales en condiciones extremas de presión y temperatura.

Líneas de investigación:

- Estudio de compuestos binarios, ternarios y cuaternarios de materiales con aplicaciones en Electrónica, Optoelectrónica y Espintrónica.
- Estudio de minerales con aplicaciones en Geofísica y Astrofísica.

Otros miembros del grupo: Óscar Gomis Hilario (TU), Rosario Isabel Vilaplana Cerdá (TU), Vanesa Paula Cuenca Gotor (COL), Juan Ángel Sans Tresserras (RyC), Estelina Lora da Silva (MSC) y Samuel Gallego Parra (PRE)

2) **Daniel Errandonea Ponce (TU)**

Universitat de València (UV)

Grupo de Semiconductores bajo condiciones extremas

MAT2016-75586-C4-1-P (IP)

Objetivos del grupo: Síntesis y caracterización de las propiedades estructurales, ópticas, vibracionales y eléctricas de materiales en condiciones de alta presión y alta temperatura.

Líneas de investigación:

- Estudio de semiconductores, materiales multiferróicos, materiales ultraduros, materiales barocalóricos, zeolitas y minerales
- Estudio de transiciones de fase y amorfización inducidas por presión y/o temperatura. Fases metastables.

Otros miembros del grupo: Alfredo Segura García del Río (CU), Domingo Martínez García (TU), Julio Pellicer Porres (TU), Chantal Ferrer Roca (TU), David Santamaría Pérez (RyC), Virginia Monteseguro Padrón (JdC), Enrico Bandiello (POS), Tomás Marqueño Villanueva (PRE) y Josu Sánchez Martín (PRE).

3) **Alfonso Muñoz González (CU)**

Universidad de La Laguna (ULL)

Grupo de estructura electrónica y simulación de materiales y nanomateriales

MAT2016-75586-C4-3-P (IP)

Objetivos del grupo: Simulaciones ab initio de propiedades estructurales, electrónicas, dinámicas y elásticas de materiales y nanomateriales bajo condiciones extremas.

Líneas de investigación:

- Transiciones de fase bajo condiciones extremas de presión.

- b) Efectos de temperatura y expansión térmica.
- c) Efectos anarmónicos.

Otros miembros del grupo: Plácida Rodríguez Hernández (TU), Andres Mújica Fernaud (TU) y Silvana Radescu Cioranescu (TU).

4) Javier González Platas (TU)

Universidad de La Laguna

Grupo de Luminiscencia y Rayos X

MAT2016-75586-C4-4-P (miembro del equipo de investigación)

Objetivos del grupo: Estudio de materiales ópticos dopados con materiales luminiscentes (fundamentalmente iones de Tierras Raras) con aplicaciones en Fotónica, Energía Solar, Optoelectrónica y Sensores.

Líneas de investigación:

- a) Síntesis de nuevos materiales (perovskitas y granates) a escala micro y nano con diferentes métodos incluyendo condiciones extremas de presión y temperatura.
- b) Preparación y caracterización de micro-resonadores ópticos para aplicaciones en sensores y microláseres.
- c) Cavidades para micro-optofluídica.
- d) Nuevos materiales ópticamente activos como sensores de presión y temperatura.

Otros miembros del grupo: Inocencio Rafael Martín Benenzuela (CU), Víctor Lavín della Ventura (TU) y Ulises Ruyman Rodríguez Mendoza (TU).

5) Valentín García Baonza (CU)

Universidad Complutense de Madrid (UCM)

Grupo de Altas Presiones: Determinación de parámetros espectroscópicos y termodinámicos

CTQ2015-67755-C2-1-R (IP) y MAT2015-71070-REDC (IP)

Objetivos del grupo: Estudio experimental y teórico de termodinámica y espectroscopía de materiales en condiciones extremas de presión y temperatura.

Líneas de investigación:

- a) Alta Presión y Condiciones Extremas de Temperatura. Desarrollo Instrumental de celdas de Tipo Yunque y Técnicas Acopladas a Celdas de Tipo Yunque.
- b) Espectroscopia Raman. Caracterización de Compuestos Orgánicos, Polímeros, Sistemas derivados de carbono, etc.
- c) Nuevos Modelos de Enlace Químico Basados en Potenciales Universales de Interacción y cálculos de propiedades espectroscópicas mediante metodologías DFT.

Otros miembros del grupo: Javier Núñez Delgado (CU), Mercedes Cáceres Alonso (CU), Mercedes Taravillo Corralo (TU), José Tortajada Pérez (TU), María Elena Arroyo de Dompablo (TU), Francisco Javier Sánchez Benítez (COD), Óscar Rodríguez Montoro (POS), Álvaro Lobato Fernández (PRE) y Ana Isabel Casado Gómez (PRE).

6) Fernando Rodríguez González (CU)

Universidad de Cantabria (UCAN)

Grupo de Altas Presiones y Espectroscopía

MAT2015-69508-P (IP) y RTC2015-4304-3 (IP)

Objetivos del grupo: Investigación experimental en el campo de las propiedades ópticas de materiales aislantes y semiconductores, que abarca desde la síntesis y caracterización de los materiales hasta el estudio de sus propiedades en condiciones extremas de presión y temperatura y su eventual aplicación como sensores, biomarcadores, vidrios fotovoltaicos, etc.

Líneas de investigación:

- a) Materia en condiciones extremas de alta presión y alta/baja temperatura: propiedades electrónicas, mecánicas y estructurales (transiciones de fase, cruzamiento de espín, metalización, fotoluminiscencia, materiales ultraduros, etc.).
- b) Desarrollo de instrumentación en celdas de alta presión y técnicas espectroscópicas no destructivas.

- c) Correlaciones entre la estructura y las propiedades ópticas y magnéticas en sistemas Jahn-Teller de Cu^{2+} , Ni^{3+} , Mn^{3+} y Co^{3+} .
- d) Upconversion y downconversion en sistemas mixtos de iones de tierras raras – metales de transición.
- e) Plasmónica a alta presión.
- f) Sistemas derivados de carbono: nanotubos, grafeno, grafito y diamante y sistemas embebidos.

Otros miembros del grupo: Ignacio Hernández Campo (COD), Javier Ruiz Fuertes (AYD), Jesús González Gómez (POS), Enrique Jara Martínez (PRE), Vanessa Gutiérrez Cano (PRE), Camino Martín Sánchez (PRE) y Marina Teresa Candela de Aroca (PRE).

7) Alberto Otero de la Roza (RyC)

Universidad de Oviedo (UOVI)

Grupo de química teórica y computacional

CTQ2015-67755-C2-2-R (proyecto del grupo de investigación)

Objetivos del grupo: Estudios de química computacional y modelización teórica de materiales en condiciones extremas de presión y temperatura.

Líneas de investigación:

- a) Desarrollo de software para el tratamiento computacional de sólidos bajo presión.
- b) Aplicación de técnicas computacionales para la predicción del comportamiento microscópico de materiales bajo condiciones extremas.

Otros miembros del grupo: José Manuel Recio (CU), Ángel Martín Pendás (CU), Evelio Francisco Miguélez (TU), Víctor Luaña Cabal (TU), María Aurora Costales Castro (TU), Miguel Ángel Salvadó Sánchez (TU), Ruth Álvarez-Uría Franco (TU), María del Pilar Pertierra Castro (TU), Manuel Flórez Alonso (TU), Dimas Suárez Rodríguez (TU), Natalia Díaz Fernández (TU) y Pedro Braña Coto (POS).

8) Laura Otero García (CT)

Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición ICTAN-CSIC

Grupo de Conservación de Alimentos

AGL2012-39756-C02-01 (miembro del equipo de investigación)

Objetivos del grupo: Evaluar el potencial de distintos procesos innovadores para mejorar la conservación de alimentos; bien prolongando su vida útil o bien mejorando la calidad del producto, tanto desde un punto de vista microbiológico como organoléptico y nutricional.

Líneas de investigación:

- a) Caracterización de nuevas técnicas de procesado y conservación de alimentos con alta presión.
- b) Estudio de nuevas tecnologías de congelación y sus efectos en la calidad de alimentos.
- c) Entendimiento del comportamiento de los alimentos durante el procesado en base a sus propiedades físicas.
- d) Evaluación del efecto de los parámetros del proceso en la calidad de los alimentos.

Otros miembros del grupo: Miriam Pérez Mateos (CT).

9) Antonio José Trujillo Mesa (CU)

Universitat Autònoma de Barcelona (UAB)

Grupo CIRTTA

AGL2017-83331-R (IP)

Objetivos del grupo: Investigar sobre ciencia y tecnología de los alimentos, transfiriendo los conocimientos adquiridos a la sociedad, tanto a través de entidades públicas como privadas con el objetivo de contribuir a la innovación y desarrollo, y por lo tanto a su competitividad en el campo de la Calidad y la Seguridad de los alimentos.

Líneas de investigación:

- a) Seguridad Alimentaria.
- b) Procesamiento y Control de Alimentos.
- c) Calidad e Innovación de los Alimentos.

Otros miembros del grupo: Buenaventura Guamis López (CU), Reyes Pla Soler (CU), Marta Capellas Puig (TU), Victoria Ferragut Pérez (CU), M. Manuela Hernández Herrero

(TU), Montserrat Mor-Mur Francesch (TU), Jordi Saldo Periago (TU), Artur-Xavier Roig Sagués (TU), Manuel Castillo Zambudio (PL), Bibiana Juan Godoy (PL), Martín Nicolás Buffa Dunat (POS), Anna Zamora Viladomiu (POS), Alicia Subires (POS), Idoia Codina Torrella (POS).

10) Olga Prieto Ballesteros (IC)
Centro de Astrobiología CAB (INTA-CSIC)
Grupo de Geología Planetaria
ESP2017-89053-C2-1-P (IP)

Objetivos del grupo: Determinación de la habitabilidad del Sistema Solar, con especial atención en Marte, Europa y otras lunas con océanos.

Líneas de investigación:

- Mineralogía planetaria.
- Geoquímica de fluidos del interior de las lunas heladas del Sistema Solar.
- Misiones planetarias al sistema solar exterior.
- Caracterización de la geología asociada a ambientes extremos.
- Desarrollo de instrumentación de laboratorio para la simulación planetaria.

Otros miembros del grupo: María Victoria Muñoz Iglesia (POS), María Teresa Fernández Sampedro (CSD).

11) Juan Manuel Andrés Bort (CU)
Universitat Jaume I de Castelló (UJI)
Grupo de Química Teórica y Computacional
CTQ2015-65207-P (IP)

Objetivos del grupo: investigación en la frontera del conocimiento de la química, física, bioquímica, ciencia de los materiales y nanotecnología.

Líneas de investigación:

- Estructura y reactividad química de interés farmacológico. Mecanismos de reacciones enzimáticas a presión ambiente y altas presiones.
- Estudios teórico-experimentales sobre la relación entre los materiales sólidos no moleculares y sus agrupamientos análogos.
- Química computacional: Nanociencia y nanotecnología.
- Diseño racional de materiales a escala micro y nano.

Otros miembros del grupo: Armando Beltrán Flors (CU).

12) Jordi Ibáñez Insa (CT)
Instituto de Ciencias de la Tierra Jaume Almera ICTJA (CSIC)
Grupo de Altas Presiones
FIS2017-83295-P (miembro del equipo de investigación)

Objetivos del grupo: Caracterización de las propiedades de minerales tanto en condiciones normales como en condiciones extremas de presión y temperatura.

Líneas de investigación:

- Propiedades ópticas de los sólidos: espectroscopía Raman y caracterización óptica de materiales a presión ambiente y bajo presión.
- Caracterización química y estructural de minerales; caracterización cuantitativa y cualitativa de rocas sedimentarias y materiales volcánicos.
- Cristalografía bajo presión hidrostática: compresibilidad y transiciones de estado de los materiales.
- Dinámica y Estructura de la Tierra: modelización teórica de procesos de subducción y de procesos de orogenia.

Otros miembros del grupo: Yvone Jiménez Munt (CT) y Manuel Fernández Ortega (PF).

13) Aitor Bergara Jauregui (TU)
Universidad del País Vasco (UPV-EHU)
Materials Computation and Theory Group
FIS2016-76617-P (IP)

Objetivos del grupo: Simulación teórica de propiedades físicas fundamentales (ópticas, electrónicas y magnéticas) de materiales mediante métodos de primeros principios para

avanzar en el diseño de nuevos materiales con propiedades no observadas previamente en condiciones normales.

Líneas de investigación:

a) Predicción del origen físico a nivel microscópico de propiedades físicas fundamentales en materiales sometidos a altas presiones.

Otros miembros del grupo: Ion Errea Lope (PA) y Aritz Leonardo Liceranzu (LAB).

14) Antonio Castro Dorado (PI)

Instituto de Geociencias IGEO (CSIC-UCM)

Grupo de Geoquímica Experimental a Altas Presiones y Altas Temperaturas

CGL2013-48408-C3-1-P (IP)

Objetivos del grupo: Petrología y caracterización geoquímica de rocas graníticas en las condiciones de la corteza terrestre.

Líneas de investigación:

a) Petrología y Geoquímica

b) Equilibrio de fases experimentales en la corteza terrestre

c) Vulcanismo

d) Modelado petrogenético

Otros miembros del grupo: José María Cebriá Gómez (CT), Iván Serrano Muñoz (PRE).

15) Catalin Popescu (CIL)

Consorci per a la Construcció, Equipament i Explotació del Laboratori de Llum Sincrotró (CELLS - ALBA)

Beamline staff

FIS2017-83295-P (co-IP)

Objetivos del grupo: Caracterización de materiales a altas presiones mediante radiación sincrotrón.

Líneas de investigación:

a) Caracterización de las propiedades estructurales de materiales sometidos a altas presiones mediante difracción de rayos X en polvo y monocristal.

b) Caracterización de las propiedades estructurales de materiales sometidos a altas presiones mediante absorción de rayos X y espectroscopías de emisión.

c) Caracterización de las propiedades estructurales de materiales sometidos a altas presiones mediante espectroscopía infrarroja.

Otros miembros del grupo: Carlo Marini (CIL), Ibraheem Yousef (CIL).



Distribución geográfica de los quince grupos de investigación que participan en la red **MALTA-Consolider Team**.

Una de las razones fundamentales para la excelente coordinación de nuestra red reside en el aprovechamiento de la inversión realizada en infraestructuras de uso común. Estas infraestructuras se ubicaron en los grupos de mayor tamaño y envergadura dentro de la red **MALTA-Consolider Team** a lo largo y ancho del territorio nacional atendiendo a criterios de experiencia y complementariedad científico-tecnológica de los grupos receptores. La inversión original en estas infraestructuras superó los 2 M€ (40% de los fondos del proyecto MALTA). Es por tanto absolutamente necesario mantener la red **MALTA-Consolider Team** si se pretende el objetivo de seguir amortizando dichas infraestructuras y apostar por el desarrollo de nuevas infraestructuras que complementen las ya existentes.

Las infraestructuras disponibles en la red **MALTA-Consolider Team** son:

UCM: Difractómetro Xcalibur adaptado para Alta Presión (Monocristal y Polvo Cristalino). Equipo de mecanizado por control numérico. Celda tipo megabar Almax-Boehler y ocho celdas de diamante de diseño propio repartidas por los diferentes grupos. Inversión 500.000 euros.

UV: Espectroscopía FTIR Bruker IFS 125HR. Sistema de calentamiento láser. Sistema de carga de celdas con gas. Inversión 450.000 euros.

UCAN: Espectrómetro Raman Horiba T64000 y excitación láser multilínea Coherent (Ar/Kr). Inversión 400.000 euros.

UAB: Sistema de gran volumen para medida de muestras líquidas a alta presión Stansted. Inversión 350.000 euros.

UOVI: Clúster de computación (con más de 1.000.000 de trabajos realizados) y mantenimiento de la página de la red www.malta-consolider.com. Inversión 500.000 euros.

3. IMPACTO ESPERADO DE LOS RESULTADOS

La ciencia de altas presiones tiene un marcado carácter multidisciplinar por lo que nuestros resultados científicos tienen un importante impacto no solo en ciencias básicas como la Física, la Química, la Biología y la Geología, sino también en áreas más transversales, como la Ciencia de los Materiales, las Ciencias de la Tierra y las Ciencias de la Vida.

Los objetivos que se plantea la red MALTA-Consolider Team para los años 2020 y 2021 son:

- 1) Organizar reuniones anuales de la red. Estas reuniones sirven de punto de contacto y nexo de unión entre los diferentes grupos de investigación y tienen fundamentalmente una vertiente gestora ya que sirven de plataforma para i) rendir cuentas de las actividades de la red y ii) nuclear la planificación de acciones futuras. Se pretende fomentar la participación de los grupos de la red en proyectos que favorezcan la cooperación nacional (proyectos coordinados del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020) e internacional (fundamentalmente en proyectos H2020 como las redes ITN o RISE), prestando especial atención a la captación de recursos en el entorno del Espacio Europeo de Investigación.
- 2) Organizar la EAP/SUPS en 2021. Esta escuela permite la formación de investigadores en las técnicas de altas presiones gracias a un entorno multidisciplinar que permite hacer frente a los retos científicos y tecnológicos del siglo XXI.
- 3) Fomentar la transferencia de tecnología al tejido industrial en la línea que hemos venido desarrollando desde 2008, tanto apoyando a diversas empresas nacionales (Cryovac-Anevac SL, AB Biotics, NC Hyperbaric) y extranjeras (Almax-EasyLab, Betsa y Stansted HP), como continuando con el desarrollo de la spin-off *YPSICON Ultra Alta Presión* participada por el grupo de la UAB.
- 4) Participar en actividades de divulgación y promoción de la red, tanto a través de la página web de la red www.malta-consolider.com como asistiendo a ponencias y congresos nacionales e internacionales. Es de destacar que la red **MALTA-Consolider Team** organizará la conferencia 58-EHPRG en Tenerife en septiembre de 2020. También se contempla la divulgación de la red en el festival "Pint of Science" que se celebra en diversas ciudades españolas, en la "Semana de la Ciencia" organizada en diversos centros de investigación y a través de blogs, como "La Física

del Grel” (<https://grel.es/>) en la que participan algunos miembros de los grupos de investigación de la red.

Como se ha comentado previamente, dos de los tres sincrotrones más avanzados del mundo (ESRF y APS) tienen divisiones dedicadas exclusivamente a la investigación de materiales en condiciones extremas. Es más, la mayoría de los sincrotrones del mundo tienen líneas dedicadas al estudio de materiales a altas presiones. Esto se puede extrapolar también a las principales fuentes mundiales de neutrones como el ILL, que tiene un difractor especialmente dedicado a altas presiones (*XtremeD*) en el que nuestra red ha tenido un papel importante. Por lo tanto, la presencia de la red **MALTA-Consolider Team** es importante para posicionar internacionalmente a los grupos españoles del campo de las altas presiones de cara a aprovechar las últimas tecnologías en grandes instalaciones de neutrones, como la ESS que se está construyendo en Suecia; de radiación sincrotrón, como la Extreme Brilliant Source (EBS) que se está instalando actualmente como mejora en el ESRF (<https://www.esrf.eu/about/upgrade>); y del instrumento High Energy Density (HED) (https://www.xfel.eu/facility/instruments/hed/index_eng.html) en el recién construido láser pulsado de rayos X ultraintensos (XFEL, Alemania). Además, las tecnologías aprendidas en estas grandes instalaciones servirán para mejorar las líneas del sincrotrón español ALBA, con el que nuestra red tiene excelentes relaciones, como demuestra que varios científicos de plantilla de tres de sus líneas forman parte de nuestra red.

La consecución de los objetivos propuestos queda garantizada por la dilatada y demostrada experiencia de la red **MALTA-Consolider Team** en sus diferentes especialidades y el alto grado de coordinación existente entre los grupos. En este sentido, se ha de mencionar que los nuevos grupos que se incorporan a la red de investigación vienen colaborando de forma asidua con miembros del proyecto MALTA desde hace más de 5 años.

BREVE JUSTIFICACIÓN DEL PRESUPUESTO SOLICITADO

De acuerdo con lo expresado en la convocatoria de Redes de Investigación, la subvención que solicitamos se concreta en tres partidas:

- 1) **Gastos de personal**, para realizar tareas de apoyo a la gestión de la red y la potenciación de acciones futuras.
- 2) **Gastos derivados de la organización y asistencia a actividades científico-técnicas de la red**: viajes, dietas y gastos de ejecución de dos reuniones de coordinación (una en 2020 y otra en 2021) y de la décima edición de la EAP /SUPS (prevista para 2021 en la UPV).
- 3) **Otros gastos**: asociados al desarrollo y mantenimiento de la página web www.malta-consolider.com, a los gastos de publicidad de la red y al alquiler de salas y medios audiovisuales para algunas de las actividades relacionadas anteriormente.

En la tabla adjunta se resume el presupuesto solicitado para los años 2020 y 2021, y que se encuentra justificado en la solicitud telemática.

CONCEPTO		Solicitado €
COSTES DIRECTOS	Personal	40.000
	Viajes y dietas	80.000
	Otros gastos	25.000
TOTAL		145.000

El presupuesto solicitado tiene en cuenta que en la red participan 15 grupos de investigación (el máximo permitido en la convocatoria) y que en cada reunión de la red se estima una participación de 20-25 asistentes.