

MEMORIA DE ACTIVIDADES 2005

1.4 DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACION

1.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del Departamento: Dr. Tiberio A. Ezquerra Sanz

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Dr. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación

Dr. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular

Dra. María Esperanza Cagiao Escohotado

Científica Titular

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científica Titular

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Investigadora Contratada

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Contratada

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Investigador Contratado

Dr. Rudiger K. Bayer

Sabático (MEC)

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Becario Postdoctoral

Dña. M^a Teresa Expósito Espinosa

Becaria Predoctoral

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Becario (UE)

Dña. Sandra Martín Rauseo

Becaria Predoctoral

Dña. Sonia Martínez Hedo

Becaria Predoctoral

Dña. Inés Puente Orench

Becaria Predoctoral

D. Alejandro Sanz Parras

Becario Predoctoral

Personal de apoyo:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado

Dña. Ana M. Montero Cuéllar

Ayudante de Investigación

Capítulo 2

LABOR INVESTIGADORA

2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Modelización, síntesis, caracterización, dinámica, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Fenómenos de precristalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales
- Síntesis y modelización de nuevas poliolefinas con arquitectura controlada
- Mecanismos de microdeformación y optimización de propiedades mecánicas
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas
- Estructura y propiedades de materiales nanocompuestos
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica
- Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Difracción de rayos X a ángulos pequeños y ángulos grandes
- Espectroscopía de relajación dieléctrica de banda ancha
- Medidas de Micro y Ultramicrodureza
- Calorimetría Diferencial de Barrido
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua
- Reometría de Extrusión Capilar
- Análisis Dinamo-mecánico en Flexión
- Análisis Mecánico en Tracción: modulo elástico
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización
- Cálculos mecano-cuánticos mediante Teoría de Funcionales de la Densidad
- Modelización Molecular Asistida por Ordenador. Aplicaciones a Polímeros.
- Microscopía óptica y AFM
- GPC y dispersión de luz multiángulo a alta temperatura
- Difracción de rayos X con superficies
- Microscopio de fuerzas atómicas
- Espectroscopias de absorción (XPS, Auger, UPS)

LABOR INVESTIGADORA:

Cinética de precursores de cristalización inducida mediante cizalla.

En colaboración con el grupo de investigación de la Profesora J. Kornfield, California Institute of Technology, se ha instalado, en la línea BM26 del ESRF, Grenoble, un equipo para la detección de estructuras incipientes diluidas en el fundido bajo la acción de una cizalla. Mediante utilización de detectores bidimensionales de tiempo de resolución rápido, se han efectuado estudios preliminares de difracción simultánea a ángulos bajos (SAXS) y grandes (WAXS) en muestras de polipropileno isotáctico (iPP). Los diagramas de difracción, tomados a tiempos muy cortos (varios segundos) después de aplicar la cizalla a las estructuras orientadas de iPP en el fundido, indican la presencia de máximos ecuatoriales ($hk0$). Los diagramas a ángulos bajos presentan dos máximos meridionales asociados a un empaquetamiento de laminillas orientadas perpendicularmente a la dirección de cizalla. Los resultados obtenidos indican que los diagramas de SAXS aparecen unos cuantos segundos antes que los picos de difracción (WAXS) correspondientes a la presencia de los primeros cristales. Estos resultados serían compatibles con la formación de fluctuaciones de densidad electrónica de largo alcance durante el periodo previo a la cristalización.

Detección de estructuras nanolaminares mediante difracción de rayos-X a ángulos ultra-bajos.

Se ha continuado con la investigación estructural de sistemas multilaminares constituidos por laminillas alternantes de polietileno tereftalato (PET) y policarbonato (PC) preparadas en los laboratorios de la Universidad de Cleveland (Prof. E. Baer), mediante el proceso de coextrusión multiplicativa. Este método permite la preparación de muestras de gran uniformidad de hasta varios miles de nanolaminillas. Con objeto de obtener una información estadística sobre la naturaleza de los empaquetamientos laminares de este sistema, se ha utilizado la técnica de difracción de rayos X a ángulos ultra-bajos (USAXS) disponible en la línea BW4 del anillo DORIS III en el Sincrotrón HASYLAB/DESY de Hamburgo. El objetivo de este estudio preliminar ha sido el análisis de los diagramas de difracción de rayos X correspondientes a la periodicidad de la densidad electrónica de las capas alternantes de PET y PC. La intensidad difractada se midió con una cámara CCD (2048x2048 pixels). Los diagramas de USAXS obtenidos a lo largo de la dirección meridional de empaquetamiento con máximos de difracción de 420, 170 y 110nm, respectivamente, se ajustan satisfactoriamente a los valores nominales de las muestras multilaminares de PET/PC. Otros aspectos de esta investigación incluyen la incorporación de la interfase entre capas adyacentes en los cálculos teóricos y la aplicación del modelo de para-cristal para estimar el grado de fluctuación del empaquetamiento de las laminillas de la red unidimensional.

Evolución de la estructura de materiales compuestos con fulereno mediante difracción de rayos X.

Se ha investigado la evolución de la nanoestructura en materiales compuestos de poliimida/fulereno C60 (PI/C60), sometidos a tratamiento térmico, mediante difracción de rayos X a ángulos grandes y pequeños "in situ", utilizando la línea A2 en el sincrotrón HASYLAB/DESY de Hamburgo. El material obtenido mediante la adición del C60 a las diaminas durante el primer paso de la reacción (obtención del ácido poliámico, PAA), exhibe la aparición de un máximo en el diagrama de rayos X a ángulos bajos (SAXS). Los resultados obtenidos indican que este máximo viene

fuertemente afectado por el tratamiento térmico, desapareciendo finalmente a alta temperatura. El análisis de los experimentos de difracción permite caracterizar la forma en que las nanopartículas se añaden a los otros reactivos, e influyen en las propiedades finales del material compuesto. Se ha propuesto un modelo estructural que ilustra los cambios que sufre la nanoestructura de dicho material compuesto durante el tratamiento térmico.

Desarrollo estructural e influencia de la fracción amorfa rígida durante la cristalización de polímeros amorfos.

En colaboración con el Dr. M. Pieruccini del CNR, Messina, se ha efectuado una investigación sobre las propiedades mecánicas (dureza, módulo elástico, etc.) de muestras de PET cristalizado a partir del estado vítreo con objeto de establecer una correlación entre dichas propiedades y la nanoestructura. Se ha efectuado un análisis del espesor de los nanocristales mediante investigación de la función de distribución de interfase obtenida a partir de los diagramas de difracción de rayos X a ángulos bajos obtenidos en la línea A2 del Sincrotrón DESY (Hamburgo). Los resultados obtenidos indican que para temperaturas de cristalización (T_c) por debajo de 190°C aparecen dos poblaciones de empaquetamientos de nanocristales. Sin embargo, por encima de 190°C solamente aparece una distribución unimodal de tamaños de cristal.

Las variaciones de la microdureza y módulo elástico se pueden explicar en función de los cambios de cristalinidad y tamaño de cristal con el aumento de T_c . Para la temperatura de $T_c = 190^\circ\text{C}$ se obtiene un valor de microdureza anormalmente elevado que se ha asociado al papel que juega la fase amorfa rígida en las regiones constreñidas por empaquetamientos laminares de cristales adyacentes.

Nanoestructura y deformación mecánica de aleaciones poliméricas.

En colaboración con el Prof. G. H. Michler, de la Universidad de Halle, se han investigado la morfología y las propiedades mecánicas de las mezclas de un copolímero asimétrico en bloque de poliestireno/polibutadieno (morfología co-continua), con los correspondientes homopolímeros de bajo peso molecular. El estudio se ha llevado a cabo mediante microscopía electrónica de transmisión, medida de la microdureza, y de las propiedades mecánicas macroscópicas (diagramas tensión-deformación). Los resultados obtenidos indican que el mecanismo de deformación de estos sistemas viene modificado significativamente debido a la presencia de cadenas homopoliméricas sin conexiones intermoleculares, lo que conduce a una disminución de sus propiedades mecánicas. En contraste con las aleaciones poliméricas comunes, en las que los valores de microdureza (H) siguen aproximadamente la ley de aditividad, en estos sistemas los valores H presentan grandes desviaciones del comportamiento aditivo. Este comportamiento anómalo de las propiedades mecánicas se ha discutido en función de los procesos locales de flujo debidos a la morfología de fases separadas a escala nanométrica.

Propiedades micromecánicas de materiales nanocompuestos con nanotubos de carbono.

Los materiales poliméricos nanocompuestos con nanotubos de carbono (CNT) se están convirtiendo en sistemas estructurales importantes debido a sus buenas propiedades mecánicas y a su fácil procesabilidad. El objetivo de esta investigación, en colaboración con el Dr. G. Broza de la Universidad de Hamburg-Harburg, ha sido estudiar la

influencia de la concentración de los nanotubos de carbono añadidos a los polímeros termoplásticos (polibutilen tereftalato) en las propiedades micromecánicas. Los materiales compuestos han sido preparados mediante dispersión de los nanotubos en una disolución de 1,4-butanodiol mediante la utilización de ultrasonidos. Finalmente los materiales nanocompuestos fueron sometidos a una extrusión seguida de una inyección en molde. Las muestras fueron adicionalmente caracterizadas mediante microscopía electrónica. La variación de las propiedades micromecánicas (microdureza) de los materiales nanocompuestos en función de la temperatura y del contenido de nanotubos se ha analizado a la luz de la interacción mecánica entre la matriz polimérica y los nanotubos, el grado de dispersión, la naturaleza de los nanotubos y otros parámetros estructurales.

Morfología y propiedades de materiales nanocompuestos con polímeros naturales.

Se han investigado las propiedades micromecánicas de materiales compuestos formados por almidón y micropartículas de madera en función del contenido en estas últimas, y de las condiciones de humedad. Los materiales compuestos se han caracterizado mediante microscopía electrónica de barrido y medidas de difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS) realizadas en la línea A2 del Sincrotrón DESY (Hamburgo). (BORRAR ESTA FRASE MARCADA EN ROJO) La microdureza de estos materiales aumenta notablemente con la concentración de polvo de madera. Asimismo, la microdureza aumenta con la temperatura. En el estudio de la fluencia o “creep” (variación de la microdureza con el tiempo de carga), se ha encontrado que la constante de “creep” disminuye al aumentar el contenido de micropartículas de madera. Se ha estudiado la absorción de agua del almidón, y del material compuesto con un 30% de partículas de madera a dos temperaturas, 40 y 80°C. Tanto el almidón como el material compuesto presentan mayor dependencia con respecto a la absorción de agua a la temperatura más baja (40°C). Experimentos de secado realizados a 70°C indican que la presencia de madera no evita la pérdida de agua en los materiales compuestos.

Propiedades de superficie de polímeros vítreos: influencia del peso molecular.

En colaboración con el Prof. G.H. Michler de la Universidad de Halle, se han investigado las propiedades viscoelásticas y plásticas de diversos polímeros vítreos (poliestireno, copolímeros de poliestireno-acrilonitrilo, polimetil metacrilato, polivinil alcohol) por debajo del rango de la micra mediante análisis de la fuerza aplicada en función de la penetración en experimentos de ultramicrodureza. Los resultados obtenidos indican que los valores de la microdureza y del módulo elástico disminuyen rápidamente al aumentar la penetración del indentador unas cuantas micras. Se han obtenido nuevos datos sobre la correlación existente entre la temperatura de transición vítrea y la microdureza. Cabe resaltar la influencia existente del tratamiento térmico de varios polímeros vítreos por debajo de la temperatura de transición vítrea en las propiedades micromecánicas. Se ha investigado, asimismo, la influencia de la variación del peso molecular en las medidas de microdureza. Los resultados obtenidos se han discutido sobre la base de un modelo de entrecruzamientos moleculares recientemente desarrollado para explicar la estructura de microgrietas en polímeros amorfos.

Precursores de cristalización en polímeros naturales: almidón amorfo

Se ha investigado la evolución del almidón amorfo durante el proceso de secado mediante difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS) en tiempo real, utilizando radiación sincrotrón. Los difractogramas de este material inyectado en molde muestran la superposición de halos de difracción, indicativos de estructuras no cristalinas. La

posición de los dos máximos principales de difracción se ha asociado al “scattering” de hélices de almidón sencillas desordenadas. El tercer máximo de difracción, que aparece durante el proceso de secado, se ha asociado al “scattering” que proviene de regiones desordenadas con dobles hélices. Se ha propuesto un modelo para la “superred” del almidón que presupone una componente primaria, y una componente secundaria. La componente estable que aparece primero se ha asociado a la red de entrecruzamientos existente en el estado fundido (red primaria). La segunda componente, que aparece a temperaturas más bajas (red secundaria), se puede explicar como debida a la formación de regiones de dobles hélices que densifican la red primaria. La red secundaria aumenta notablemente durante el proceso de secado. Los experimentos de WAXS realizados durante el proceso de penetración de agua, que induce una mayor movilidad molecular, revelan una estructura helicoidal con un mejor empaquetamiento, que es la precursora de la formación de dobles hélices en el estado cristalino.

Fenómenos de ordenamiento en polímeros mediante detección simultánea de difracción de rayos X y espectroscopía dieléctrica.

Hemos continuado la línea de investigación experimental encaminada a obtener tanto información estructural, mediante difracción de rayos X, como dinámica, mediante espectroscopía dieléctrica, de forma simultánea durante procesos de ordenamiento en polímeros. Para la realización de estos experimentos hemos hecho uso de luz sincrotrón en el Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) de Hamburgo, Alemania. En particular hemos investigado el ordenamiento esméctico en muestras de polybibenzoatos en un amplio espectro de frecuencia. Los resultados obtenidos permiten proponer un modelo de formación de laminillas esmécticas.

Cristalización en líquidos mediante difracción de neutrones y espectroscopía dieléctrica.

Continuando en el intento de profundizar en los fenómenos de cristalización en materia condensada blanda hemos optimizado una célula especial que permite la realización simultánea de experimentos de difracción de neutrones y de espectroscopía dieléctrica en el Institut Laue Langevin (ILL). Adicionalmente se ha investigado la dinámica de la fases cristalina de acetona poniéndose de manifiesto la importancia de los defectos estructurales.

Cristalización en medios confinados: Mezclas de polietilentereftalato (PET) y polinaftalen dicarboxilato (PEN).

Mediante difracción de rayos X a ángulos altos y bajos (SAXS, WAXS) y espectroscopía dieléctrica hemos seguido de forma simultánea procesos de cristalización de PET confinado en una matriz vítrea de PEN. Para la realización de estos experimentos hemos hecho uso de luz sincrotrón en el Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) de Hamburgo, Alemania. Los efectos de confinamiento inducidos en la cristalización permiten avanzar en la comprensión de la morfología que presentan muchos poliésteres aromáticos.

Cristalización de polímeros controlada mediante plantillas nanoestructuradas

Mediante difracción de rayos X a ángulos bajos (SAXS) se ha caracterizado el desarrollo de estructuras organizadas en polipropileno isotáctico originalmente fundido mediante el uso de sorbitol (DBS). Los resultados indican que existe una concentración crítica de DBS por encima de la cual este actúa como una plantilla permitiendo dirigir la morfología obtenida en el polímero. La implicación de este fenómeno en la obtención de nanoestructuras poliméricas definidas está siendo explotada en otros sistemas

basados en nanotubos de carbono.

Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

Dentro de la actividad de nuestro grupo en la red europea “Carbon Nanotubes” (CNT-network) se han realizado medidas de difracción de rayos X a ángulos altos y bajos con radiación sincrotrón en nanocomposites poliméricos inyectados en molde basados en nanotubos de carbono de pared simple (Single Wall Carbon Nanotubes, SWCNT) y polybutilentereftalato (PBT). Se ha puesto de manifiesto la heterogeneidad de la distribución de la red de nanotubos y su relación con los flujos de elongación y cizalla. En esta investigación han sido de gran utilidad las medidas de espectroscopía Raman realizadas en colaboración con la Dra. Concepción Domingo y que se prevén de gran interés en el inmediato futuro para esta línea de investigación.

Dinámica Molecular en sistemas amorfos

En colaboración con la Dra. Cristina Alvarez de la Universidad Politécnica de Madrid se ha continuado con la investigación sobre la dinámica molecular en materiales amorfos mediante la técnica de Espectroscopía Dieléctrica de Banda Ancha. En este aspecto se han estudiado, entre otras, las relajaciones por debajo y por encima de la transición vítrea de sustancias de interés farmacológico como son las derivadas del ácido salicílico.

Consecución de una línea de “Difracción no cristalina para ciencia de los materiales y de la vida con microfoco” en el sincrotrón español ALBA (San Cugat del Vallés, Barcelona).

Como es conocido, España contará con una fuente de luz sincrotrón en Barcelona (<http://www.cells.es>) que se espera sea operativa en 2009. En Diciembre de 2004 se presentaron diez propuestas de líneas ante un comité internacional que, en Abril de 2005, seleccionó siete líneas para que estuvieran a disposición de los usuarios con la apertura del sincrotrón en 2009. En particular una de las seleccionadas ha sido la línea “Non crystalline diffraction for life and Material Sciences with Modular Microfocus Option” (<http://www.iem.cfmac.csic.es/fmacro/sincropol.htm>) que fue promovida por los miembros del Departamento de Física Macromolecular: M.C. García Gutiérrez, A. Nogales y T.A. Ezquerro y defendida por este último el 21 de Febrero de 2005 ante el Scientific Advisory Committee(SAC) de ALBA. Esta estación experimental abre expectativas totalmente inéditas para los investigadores españoles en diversos campos que incluyen tanto la Física, la Química o la Biología como la Ciencia de los Materiales.

Modelización del proceso de copolimerización etileno-estireno mediante catálisis homogénea

Se han simulado a nivel teórico mecano-cuántico correspondiente al formalismo de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) diversos sistemas y procesos relacionados con la copolimerización de etileno y estireno en catálisis homogénea. Cabe destacar el trabajo realizado con la incorporación del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) en los cálculos de los perfiles energéticos de los procesos de inserción de etileno y estireno. Con la finalidad de llevar a cabo una descripción más realista del medio de reacción se ha incluido la presencia del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) en el modelo teórico y se ha evaluado la influencia de dicha especie en las barreras de inserción de etileno y estireno para el catalizador de geometría forzada, $\text{Me}_2\text{Si}(\text{C}_5\text{Me}_4)(\text{NtBu})\text{Ti}(\text{CH}_3)_2$. Dado el elevado tamaño del sistema se ha empleado para su estudio el método híbrido ONIOM (B3LYP:UFF). Los valores de energías de

formación del par iónico catalizador/cocatalizador muestran que la formación del par iónico de la especie activa para la polimerización es ligeramente más favorable que la formación del par iónico de la especie durmiente. Por otro lado, los elevados valores de energías de disociación encontrados para ambos pares iónicos muestran que dicho proceso es poco probable. Por ello, para una descripción más realista del sistema catalítico se hace necesaria la inclusión del cocatalizador en el modelo teórico. Por último, se ha encontrado que, para este sistema, el efecto del MAO es el de aumentar las barreras de inserción, siendo la influencia muy similar para ambos monómeros.

Por otro lado se ha comparado el comportamiento de las especies rac-Et(H4Ind)₂M(CH₃)₂ con las de su diastereoisómero meso-Et(H4Ind)₂M(CH₃)₂. Se ha encontrado que la actividad para el proceso de homopolimerización de etileno en la especie meso es ligeramente menor que para la especie rac. Por otro lado, las especies meso podrían ser responsables de una mayor incorporación de estireno en el copolímero que las especies rac, ya que la inserción de 1,2 estireno en las especies meso lleva a especies que son capaces de continuar el proceso de copolimerización, al contrario que en el caso de las especies rac. Asimismo, la disminución de la actividad del catalizador al incorporar estireno sería menor para las especies meso.

Modelos QSAR aplicados al estudio de la relación entre la estructura del catalizador y su actividad polimérica.

Se ha llevado a cabo un análisis de correlación entre la estructura molecular de catalizadores metalocénicos y su actividad en la polimerización de etileno. Para ello se han adaptado herramientas quimiométricas como 3D-QSAR (3-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship), usadas con éxito en el diseño de nuevos fármacos, a la casuística típica de sistemas organometálicos metalocénicos y su reactividad en la polimerización de olefinas. Dicha tecnología ha permitido por un lado, explicar la influencia relativa de distintos descriptores asociados a la estructura molecular tales como impedimento estérico, potencial electrostático y otros factores electrónicos, en la actividad catalítica de los distintos complejos. Por otra parte los modelos obtenidos han permitido predecir exitosamente la actividad de otro conjunto de catalizadores experimentados en los laboratorios de Repsol I+DT.

Simulación de Propiedades de Poliolefinas

Se están poniendo a punto diversos protocolos para la simulación de dinámica molecular de sistemas poliméricos de alto peso molecular. Para ello se están realizando cálculos en el superordenador "MareNostrum" del Centro Nacional de Supercomputación empleando hasta 256 procesadores en paralelo. La generación de estructuras iniciales se ha desarrollado en colaboración con el grupo del Profesor Theodorou de la Universidad de Atenas.

Síntesis de nuevas poliolefinas con arquitectura controlada

Se han obtenido diversas familias de copolímeros de etileno/estireno, mediante el uso de distintos catalizadores de centro activo único, con objeto de establecer el efecto de la estructura de los catalizadores en los materiales poliméricos obtenidos, tanto desde el punto de vista de actividad de las reacciones de polimerización (actividad del catalizador) como desde el punto de vista estructural (pesos moleculares y polidispersidad, incorporación de comonómero y composición química de los copolímeros). En este aspecto cabe destacar la puesta a punto de una nueva técnica de caracterización estructural de poliolefinas mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización (CRYSTAF), adecuada al estudio de la composición química de los

copolímeros de base olefínica, y que ha sido aplicada a los copolímeros modelo etileno/1-hexeno y etileno/estireno.

Para todos los sistemas catalíticos se ha comprobado que la actividad y el peso molecular de los polímeros obtenidos disminuyen a medida que la alimentación en reactor de estireno es mayor. Los catalizadores con puentes de carbono y ligandos rígidos dan lugar a copolímeros con los mayores contenidos en estireno. Se ha comprobado que algunos sistemas catalíticos, o bien no resultan viables para la incorporación de estireno, o bien dan lugar a sistemas poliméricos heterogéneos (mezclas de homo y copolímeros) o de muy bajo peso molecular. Paralelamente se ha llevado a cabo el estudio estructural y de las propiedades térmicas mediante calorimetría diferencial de barrido, así como de las propiedades mecánicas. En aumento en el contenido en estireno reduce la cristalinidad y la temperatura de fusión. El espesor de las laminillas cristalinas se ve significativamente afectado por la presencia de unidades estirénicas en la cadena polimérica. Los materiales exhiben un amplio espectro de propiedades mecánicas, en función de la cantidad de comonomero, desde las propiedades típicas de los termoplásticos cristalinos (bajos contenidos) hasta propiedades elastoméricas (elevados contenidos).

Aún más novedosos son los resultados obtenidos con un nuevo catalizador de centro activo único (sintetizado por el grupo del Prof. Antonio García, del Departamento de Química Orgánica I en la Facultad de Química de la UCM) que además de generar actividades 10 veces superiores a los otros catalizadores disponibles comercialmente (catalizadores de geometría constreñida o CGC), dan lugar a materiales con un elevadísimo peso molecular (por encima de 10^6 g mol⁻¹), de gran interés en aplicaciones donde se requiere elevada resistencia mecánica y a la fricción, como por ejemplo la prótesis de huesos, chalecos antibalas o fibras de alto módulo, con la ventaja de que además poseen una muy estrecha distribución de peso molecular. Además, los copolímeros presentan una gran homogeneidad química (evaluada mediante CRYSTAF) que los diferencia claramente de los materiales obtenidos hasta el momento mediante el uso de catalizadores comerciales CGC.

Estructura y propiedades de copolímeros modelo

En el caso de estos copolímeros de etileno/estireno, al igual que ocurría con los compuestos de etileno/1-hexeno, se ha encontrado una clara correlación entre las propiedades más básicas relacionadas con la micro y nano-estructura (temperatura de transición vítrea, grado de cristalinidad y temperatura de fusión) con el contenido en ramificaciones tipo fenilo. La combinación de las técnicas de calorimetría diferencial de barrido y espectroscopía dinamo-mecánica, ha permitido identificar claramente no solo la respuesta característica de las fases amorfa y cristalina, sino la de un tercer componente en el material, cuya respuesta parece corresponder a la de una fase desordenada aunque con un grado de rigidez semejante a la cristalina tal como mencionábamos en la memoria del año 2004. Sin embargo la naturaleza de esta fase más rígida parece ser distinta a la que se estudió con anterioridad en los copolímeros con 1-hexeno. Esta característica deja su impronta en las propiedades macroscópicas. Así, las propiedades mecánicas como el módulo elástico varían dependiendo de la fracción presente en cada una de las fases que forman el material y de la interacción existente entre las mismas, pero también de la naturaleza del comonomero. La existencia de la fase rígida o interfacial, junto con la obtención de nuevas familias

poliolefinas mediante la introducción de un comonomero de naturaleza diferente, como es el estireno (con un anillo aromático, muy rígido, presente en la fase amorfa del material), han abierto nuevas líneas de exploración en el campo de la espectroscopía vibracional RAMAN, encaminadas a la caracterización de esta tercera fase y a la determinación de la fracción correspondiente en el material, y que se extenderán al estudio morfológico de mezclas de base etilénica.

En otro contexto y en colaboración con el Dr. U.S. Agarwal y la Dra. L. Xue, del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Tecnológica de Eindhoven, se han investigado las propiedades viscoelásticas de polímeros estrella de polimetacrilato de metilo monodispersos, obtenidos mediante polimerización radicalaria por transferencia atómica. Estas estructuras se consideran modelos de polímeros ramificados, ya que todas las moléculas poseen el mismo tamaño y número de ramificaciones, y son muy útiles para probar la validez de aproximaciones teóricas basadas en la dinámica molecular.

Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas de poliolefinas modelo y mezclas

Se ha investigado en el efecto de la estructura o arquitectura molecular y/o la morfología, en el caso de las mezclas de polímeros modelo y UHMWPE, en la dinámica molecular y el flujo de materiales poliméricos.

El estudio reológico básico de los copolímeros de etileno/1-estireno ha permitido definir el estado de enmarañamiento, al igual que se realizó con anterioridad en copolímeros con 1-hexeno. Se ha visto como afecta la cantidad de la rama lateral rígida introducida por el comonomero en la dinámica de la cadena polimérica y en la dependencia de las propiedades viscoelásticas con la temperatura. El estudio de la reología del conjunto de polímeros modelo y sus mezclas con UHMWPE ha jugado un papel importante. Los puntos que más cabe destacar son la completa miscibilidad en el fundido entre los polímeros, explicada a través de las medidas reológicas en términos de la teoría de reptación.

Resultados de gran interés desde el punto de vista tecnológico, conciernen a la eliminación de las distorsiones durante los procesos de extrusión en estas mezclas. Estos resultados están basados en resultados previos obtenidos en nuestro grupo y publicados en 2004 en la revista *Macromolecules*. Se pone de manifiesto el profundo efecto que causan las colas de alto peso molecular en la dinámica molecular, en el flujo y en la procesabilidad. Se abren así novedosas vías que continuamos explorando para resolver un problema que ha estado presente en la Ciencia de Polímeros a lo largo de los últimos 30 años. El estudio realizado con mezclas de polímeros modelo con muestras de UHMWPE obtenidas en nuestro laboratorio mediante catálisis de centro activo único ha puesto de manifiesto el enorme efecto que causan las colas de alto peso molecular en la dinámica molecular y en el flujo macroscópico. Más aún, los resultados indican el origen molecular de los fenómenos de distorsión, y saca a la palestra la creencia actual, basada fundamentalmente en resultados experimentales con materiales convencionales heterogéneos, de que es a través de la incorporación de ramificaciones de cadena larga la forma de modificar molecularmente las poliolefinas al objeto de eliminar las distorsiones.

Otro aspecto interesante ha sido el estudio de la dinámica molecular (huella viscoelástica) en los copolímeros de etileno/estireno obtenidos mediante distintos sistemas catalíticos. Se ha visto que los catalizadores disponibles comercialmente

(catalizadores CGC) si bien dan lugar a materiales de gran homogeneidad estructural y a incorporaciones elevadas de comonomero, también permiten la incorporación de ramificaciones de cadena larga debido a reacciones secundarias a la polimerización. Si bien estas estructuras no van a afectar, en principio, a las propiedades en el sólido, si lo hacen a las propiedades viscoelásticas y al flujo. No es el caso de los materiales obtenidos mediante el nuevo catalizador, cuyas moléculas están caracterizadas por su absoluta linealidad.

Otros resultados obtenidos cubren desde los aspectos más básicos a los tecnológicos, como por ejemplo el estudio del proceso de cristalización en polipropileno isotáctico mediante la combinación de métodos reológicos y microscopía óptica, o la simulación por ordenador de los procesos de deformación y las propiedades viscoelásticas durante el flujo en polietilenos mediante la aplicación de métodos de elementos finitos. En este aspecto también cabe destacar la colaboración llevada a cabo con el Dr. G.W.H. Peters y la Dra. D. Hristova, del Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad Tecnológica de Eindhoven, concerniente al efecto de la arquitectura molecular en los procesos de cristalización inducida por el flujo en polipropilenos lineales y ramificados, utilizando técnicas reológicas en combinación con medidas de WAXD y SAXS realizadas en el ESRF de Grenoble. Los resultados indican, por un lado la existencia de 4 regímenes de cristalización, controlados por la cola de alto peso molecular en los polipropilenos lineales, y por otro la gran sensibilidad de las medidas reológicas a la hora de monitorizar los procesos de cristalización.

Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados

En este proyecto se aborda el estudio de diversos mecanismos para obtener materiales magnéticos nanoestructurados y autoorganizados en superficies. Este estudio intenta determinar la influencia que ejercen tanto la nanoestructuración como la autoorganización de dichas entidades en las propiedades finales exhibidas por el material y, más concretamente, en la magnetización. El objetivo final es controlar los mecanismos mediante los cuales se puedan obtener unidades estructurales magnéticas perfectamente ordenadas mediante un método fácil, económico y reproducible, con la perspectiva de poder obtener sistemas con propiedades magnéticas singulares predefinidas. Para ello optamos por métodos químicos físicos que permiten la obtención de estos sistemas fuera de entornos de ultra alto vacío. Este estudio tiene un interés no solo desde un punto de vista fundamental sino también por sus posibles aplicaciones tecnológicas como sistemas de almacenamiento de datos.

Capítulo 3

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Diseño, construcción e implementación de un sistema para experimentos simultáneos de difracción a ángulos bajos y altos con espectroscopía dieléctrica en la línea española de Radiación Sincrotrón BM16 del ESRF

Código o Referencia: FPA2001-2139

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: T. A. Ezquerra

Objetivos: Dotar a la comunidad de materia condensada blanda polimérica de una herramienta para la realización de experimentos simultáneos de difracción a ángulos altos y bajos con radiación sincrotrón.

Período: Diciembre 2001-Diciembre 2005

Nuevas Poliolefinas basadas en copolímeros de etileno

Código o Referencia: MAT2002-01242

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: J. Martínez de Salazar Bascuñana

Objetivos: Polimerización de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas básicos y diseño de nuevos materiales

Período: Marzo 2003-October 2006

Nanoestructura y optimización de propiedades micromecánicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares

Código o Referencia: FIS2004-01331

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: F. J. Baltá Calleja

Objetivos: Estudio de la correlación entre la nanoestructura y las propiedades físicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares.

Período: Diciembre 2004- Diciembre 2007

Arquitectura electroquímica aplicada a la síntesis de materiales nanoestructurados con propiedades magnéticas singulares

Código o Referencia: MAT2004-05865

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: M. J. Capitán Aranda

Objetivos: Explorar diversas vías de síntesis de nanoestructuras magnéticas en superficies prestando un especial interés al estudio de la correlación existente entre su nanoorden y las propiedades finales del material.

Período: Diciembre 2004-Diciembre 2007

Interrelaciones estructura-propiedades de materiales poliméricos y composites poliméricos nanoestructurados en volumen y en superficie

Código o Referencia: MAT2005-01768

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: T. A. Ezquerra

Objetivos: Comprensión de los fenómenos que permiten una nanoestructuración tanto en tres dimensiones (volumen) como en dos dimensiones (superficie) de materiales poliméricos semicristalinos y nanocomposites poliméricos.

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2008

Transiciones de fase y optimización de propiedades micromecánicas y tenacidad de materiales poliméricos

Código o Referencia:

Entidad Financiadora: Fundación Alexander von Humboldt Stiftung

Investigador Principal Español: F. J. Baltá Calleja

Investigador Principal Alemán: G. H. Michler

Objetivos: Investigación de los mecanismos de deformación mecánica y transiciones de fase, a nivel nanométrico en materiales poliméricos.

Período: 2001-2005

Carbon nanotubes for future industrial composites: theoretical potential versus immediate application (CNT-NET)

Código o Referencia: G5RT-CT-2001-05026

Entidad Financiadora: CE

Investigador Principal: T. A. Ezquerro

Objetivos: Formación de una red europea para la investigación y desarrollo de materiales compuestos con nanotubos de carbono y matriz polimérica.

Período: 2002-2006

Moléculas bioactivas contra *Leishmania panamensis*. Actividad y optimización molecular

Código o Referencia: COLCIENCIA

Entidad Financiadora: COLCIENCIA

Investigador Principal: F. Echeverri

Objetivos: Diseño de nuevos fármacos contra *Leishmania* basados en productos naturales o semisintéticos.

Período: Abril 2003-Marzo 2005

Structuring Polymers COST-P12

Código o Referencia:

Entidad Financiadora: EC

Investigadores Principales: T. A. Ezquerro y M. Gómez

Objetivos: Formación de una red europea para la investigación de la estructuración de polímeros sintéticos

Período: 2003-2007

Simultaneous Measurements of SAXS, WAXS and Dielectric Spectroscopy in Advanced Polymer System

Código o Referencia: II-03-073 EC

Entidad Financiadora: EC; Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: T. A. Ezquerro

Objetivos: Utilización de la radiación sincrotrón para la investigación de las relaciones entre la estructura y la dinámica en materiales poliméricos

Período: 1 Enero 2004-31 Diciembre 2006

Resolving kinetics of early structure formation during shear-induced Crystallization of polypropylene

Código o Referencia: ME-964

Entidad Financiadora: EC; European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)

Investigador Principal: F. J. Baltá Calleja

Objetivos: Estudio "in situ" de la cinética de los primeros estadios de cristalización del polipropileno bajo la acción de un mecanismo de cizalla.

Período: 2004-2005

Nanostructural control of self-assembling polymeric systems. Optimization of properties for technological applications

Código o Referencia: MERG-CT-2004-505674

Entidad Financiadora: EC

Investigador Principal: A. Nogales

Investigador Responsable: T. A. Ezquerra

Objetivos: Estudio de la nanoestructura de sistemas poliméricos autoensamblados como posible vía para la optimización de sus propiedades .

Período: Enero 2004-Abril 2005

Time and spatially resolved flow-induced nucleation precursors in crystallizable polymers

Código o Referencia: SC-1571

Entidad Financiadora: EC; European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)

Investigador Principal: M. C. García Gutiérrez

Objetivos: Estudio de la influencia de campos de deformación sobre la nucleación de cristales y su morfología, en función del tiempo y la distancia al punto de aplicación de la deformación.

Período: Octubre 2004-Marzo 2005

Nanostructure Development in Polymer Systems: Influence of External Constraints

Código o Referencia: II-04-029 EC

Entidad Financiadora: EC; Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: F. J. Baltá Calleja

Objetivos: Estudio de la cristalización de polímeros en sistemas confinados mediante métodos de difracción de rayos X.

Período: 2004-2006

Study of self-organized systems on surface

Código o Referencia: II-03-071 EC

Entidad Financiadora: EC; Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: M. J. Capitán Aranda

Objetivos: Estudio estructural mediante difracción de superficies con rayos-X de sistemas autoorganizados

Período: Enero 2004-Diciembre 2006

Multifunctional Polymeric Materials through Nanostructuring

Código o Referencia: MERG-CT-2004-511908

Entidad Financiadora: EC

Investigador Principal: M. C. García Gutiérrez

Investigador Responsable: T. A. Ezquerra

Objetivos: Preparación y estudio de la estructura y propiedades físicas de composites de nanotubos de carbono y matriz polimérica, con el fin de dotar a estos nanocompuestos de una multifuncionalidad útil para diversas aplicaciones.

Período: Enero 2005-Enero 2006

Spatially and time resolved structure formation in conducting discotic liquid crystalline (LC) systems during extrusion

Código o Referencia: ME-1024

Entidad Financiadora: EC; European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)

Investigador Principal: M. C. García Gutiérrez

Objetivos: Control de la orientación molecular y de la alineación con respecto al sustrato en cristales líquidos discoidales con el fin de utilizarlos en la fabricación de dispositivos electrónicos como FETs y LEDs.

Período: Marzo 2005-Septiembre 2005

Puntos cuánticos magnéticos autoorganizados

Código o Referencia: CM-GR/MAT/0435/2004

Entidad Financiadora:

Investigador Principal: J.M. Gallego

Investigador Participante: M.J. Capitán Aranda

Objetivos: Crecimiento y estudio estructural de puntos cuánticos con propiedades magnéticas singulares.

Período: 1 Enero 2005-31 Diciembre 2005

Sistemas modelo biomiméticos de procesos en superficies

Código o Referencia: MEyC NAN2004-08881-C02-01,

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: R. Miranda

Investigador Participante: M.J. Capitán Aranda

Objetivos: Crecimiento y caracterización de sistemas nanoestructurados inspirados en modelos biológicos.

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2008

Nanoestructuras magnéticas: Fabricación, propiedades y Aplicaciones Biomédicas y Tecnológicas

Código o Referencia: Comunidad Autónoma de Madrid-2005

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid

Investigador Principal: R. Miranda

Investigador Participante: M.J. Capitán Aranda

Objetivos: Exploración de diversas vías para la síntesis de nanoestructuras magnéticas y estudio de las aplicaciones biomédicas y tecnológicas de las mismas.

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2009

Phase behaviour of aqueous dispersions of mixtures of ceramide, cholesterol and protonated fatty acid

Código o Referencia: I-05-009 EC

Entidad Financiadora: EC, Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: E. Melo

Investigador Participante: M.J. Capitán Aranda

Objetivos: Estudio mediante difracción de rayos-X de la estructura de membranas proteínicas modelos

Período: Enero 2005-Enero 2006

Capítulo 4

COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES

4.1.6. DEPARTAMENTO DE FÍSICA MACROMOLECULAR

VI Congreso Nacional de Materiales Compuestos, Valencia, 27-29 Junio.

Determinación del estado de orientación en compuestos de PE con fibras de celulosa mediante medidas de microdureza (Comunicación oral)

C. Fonseca, A. Ochoa, M.F. Mina, C. González, P. Cardin, F. Ania

IX Reunión del Grupo Especializado de Polímeros: “Nuevas Fronteras en Polímeros, Jaca (Huesca), 11-15 Septiembre

Propiedades mecánicas de copolímeros de etileno/1-hexeno y etileno/estireno obtenidos mediante catalizadores de centro activo único (Comunicación oral)

M^a Teresa Expósito Espinosa, S. Martín, A. Flores, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar

Estudio computacional del par iónico $[\text{Me}_2\text{Si}(\text{C}_5\text{Me}_4)(\text{N}^t\text{Bu})\text{Ti}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)]^+ [-(\text{CH}_3)-\text{Al}(\text{CH}_3)_2-(\text{AlOMe})_6\text{CH}_3]^-$ como catalizador en la polimerización de etileno y estireno (Poster)

S. Martínez, V.L. Cruz, J. Ramos y J. Martínez-Salazar

II Reunión de la Asociación Española de Usuarios de Radiación Sincrotrón – AUSE, San Lorenzo de El Escorial (Madrid). 28-30 Septiembre

La difracción de superficies con rayos-X: hitos y tendencias (Conferencia)

M.J. Capitán

Aplicación de la radiación sincrotrón al estudio de la estructura y la dinámica en polímeros (Conferencia invitada)

A. Nogales

Resolving kinetics of early structure formation during shear-induced crystallization of polypropylene (Póster)

A. Flores, L. Fernández Ballester, D.W. Thurman, F. Ania, F.J. Baltá Calleja, J.A. Kornfield.

Structural changes during cold drawing of nanocomposites based on single wall carbon nanotubes and poly(ether ester) (Póster)

J.J. Hernández Rueda, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Sanz, I. Sics, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra

Order and segmental dynamics in semicrystalline polymers: poly(butylene isophthalate) (Póster)

Alejandro Sanz

Asistencia: M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

4.2.1 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Discussion Meeting: “Future perspectives of SAXS-WAXS and GSAXS experiments at HASYLAB”, Hamburgo (Alemania), 27 y 28 Enero

Nanostructure development in confined polymer systems as revealed by SAXS and WAXS (Conferencia invitada)

F.J. Baltá Calleja

Reunión del ‘Scientific Advisory Committee’ del Sincrotrón Español ALBA, Universidad Autónoma de Barcelona, Campus de Bellaterra, 20 y 21 Febrero

Propuesta de línea “Non-crystalline diffraction for life and material science with microfocus as an option”
T.A. Ezquerro

Propuesta de línea de difracción de nanoestructuras y superficie en el Sincrotrón del Vallés

M.J. Capitán

229th National Meeting American Chemical Society, San Diego, California (USA), 13-17 Marzo

Restricted Dynamics in semicrystalline aromatic polyesters (Conferencia invitada)

T.A. Ezquerro

Reunión del Comité Evaluador de propuestas “Soft Condensed Matter and Biological Materials” del ‘European Synchrotron Radiation Facility’ (ESRF), Grenoble, 20-22 Abril y 19-21 Octubre

Participación en el Comité Científico Evaluador

T.A. Ezquerro

2nd Annual European Rheology Conference ESR, AERC 2005, Grenoble (France), 21-23 Abril

A new route to eliminate surface extrudate distortions in metallocene polyethylenes with narrow molecular weight distribution (Póster)

J.F. Vega, M.T. Expósito, S. Martín, M. Aguilar and J. Martínez-Salazar

Research Project Review Panels (PRP) HASYLAB-DESY, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 2 Mayo

Asistencia a la Comisión de Evaluación:

F.J. Baltá Calleja

Symposium on the Scientific Potential of a Short Pulse Option at PETRA III, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 2 Mayo

Asistencia:

F.J. Baltá Calleja

PSC (Photon Science Committee) Meeting: “Symposium on the Scientific Potential of a Short Pulse Option at PETRA III”, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 2 Mayo .

Asistencia como Vocal del Comité Científico:

F.J. Baltá Calleja

GISAXS-Workshop, HASYLAB, Hamburgo (Alemania). 10-12 Mayo

Asistencia:

F. Ania

M.C. García Gutiérrez

D.R. Rueda

10. Symposium: Deformation Mechanisms in Micro- and Nanostructured Polymers, Halle (Alemania), 18-22 Mayo

Advances in microdeformation mechanisms in semicrystalline polymers studied by indentation methods

(Conferencia invitada)
F.J. Baltá Calleja

Deformation mechanisms in cold crystallized PET by microindentation and X-ray diffraction (Póster)
A. Flores, M. Pieruccini, N. Stribeck, F.J. Baltá Calleja

The 54th SPSJ (Society of Polymer Science Japan) Annual Meeting, Yokohama (Japón). 25-27 Mayo
Novel studies on micromechanical properties of confined polymer systems using Synchrotron Radiation techniques and nanoindentation methods (Conferencia invitada)
F.J. Baltá Calleja

European Polymer Congress 2005, Moscú (Rusia), 27 Junio-1 Julio
A molecular route to improve processability in metallocene polyethylenes (Comunicación oral)
J. Martínez-Salazar, J.F. Vega and M.T. Expósito

Meeting of the European Polymer Federation Board
Moscú (Rusia), 28 June 2005
Asistencia: J. Martínez de Salazar

5th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Lille (Francia), 7-13 Julio
On the cooperativity of the β relaxations in aromatic polymers (Conferencia invitada)
A. Nogales

Structure-dynamics relationships in crystallizing isopropanol as revealed by simultaneous dielectric spectroscopy and neutron diffraction (Conferencia invitada)
A. Sanz

230th National Meeting American Chemical Society, Washington D.C. (USA), 28 Agosto-1 Septiembre
Shear-induced self-assembly of single-wall carbon nanotubes in a polymer-nanocomposite (Conferencia invitada)
M.C. García Gutiérrez

Carbon Nanotube (CNT)-Polymer Composites International Conference, Hamburgo (Alemania), 4-7 Septiembre
Low Percolation Threshold in Nanocomposites Based On Oxidized Single Wall Carbon Nanotubes and Poly(butylene terephthalate) (Conferencia invitada)
A. Nogales, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, A. Sanz, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, C. Domingo, T. A. Ezquerra

Shear-induced self-assembly of single-wall carbon nanotubes in a polymer-nanocomposite: Templating of crystallization (Conferencia invitada)
M.C. García Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, C. Domingo, J.V. García-Ramos, T.A. Ezquerra

Asistencia:
T.A. Ezquerra, J. Hernández

Modeling Interactions in Biomolecules II, Praga (Chequia), 4-8 Septiembre
Conceptual DFT descriptors to model organometallic reactivity (Conferencia)
V.L. Cruz, J. Ramos, S. Martinez and J. Martinez-Salazar

Second Workshop of Young European Scientists, YES2005, Jagiellonian University, Cracovia (Polonia) 13-18 Septiembre
Entanglement network and molecular dynamics in single-site catalysed polyolefins (Comunicación oral)
J.F. Vega

XIV Encuentro Anual de la Asociación Alexander von Humboldt de España, Sevilla, 15-18
Septiembre
Asistencia:
F.J. Baltá Calleja

European Discussion Meeting on Polymer Physics “Polymer Crystallization”, Waldau (Alemania),
5-8 Octubre
Order and segmental mobility in semicrystalline polymers (Conferencia invitada):
T.A. Ezquerria

Management Committee Meeting COST Physics, Action P12
Waldau (Alemania), 5-8 Octubre 2005
Asistencia:
T.A. Ezquerria

Reunión del Comité de Selección de Científico de Línea en el Sincrotrón francés SOLEIL
Grenoble (Francia), 4 y 5 Diciembre 2005.
Asistencia como miembro del Comité de Selección:
T.A. Ezquerria

4.3 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Dr. Rudiger K. Bayer, Universität GH Kassel, Alemania, 13 Octubre 2004 a 12 Octubre 2005

Dr. Zlatan Denchev, Universidad do Minho, Guimaraes, Portugal, 14-17 Febrero.

Dña. Milena Ivanova Tómanova, Universidad do Minho, Guimaraes, Portugal. 14 Febrero a 13 Marzo

D. Andreas Ueberschaer, Universidad de Kassel, Alemania, 14 Febrero a 30 Marzo 2005

Dra. Lucía Fernández, Department of Chemical Engineering, California Institute of Technology. 15-24 Febrero; 29 Junio-1 Julio.

Dña. Lisa Kastner, Universidad de Heidelberg (Alemania), 4 Abril a 4 Julio 2005

Dr. Wim Bras, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble. 14-17 Junio 2005

Dr. Francesco Ciardelli, Universidad de Pisa. 20 Septiembre 2005

4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Dr. Wim Bras, Netherlands Organization for Scientific Research (NOW): **Liquid crystals, soot, polymers and other fun things to do with a SAXS beamline**

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

- Martin-Luther-Universität, Halle (Alemania). 29-31 Enero; 22 Agosto-2 Septiembre y 23-27 Noviembre.
- Instituto de Procesos Físico-Químicos, CNR, Messina (Italia). 3-13 Abril.
- Kyoto University, Kyoto (Japón). 30 Mayo-1 Junio.
- Tokyo Institute of Technology, Tokyo (Japón). 2-4 Junio.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 9-15 Junio y 19- 26 Octubre.

Tiberio A. Ezquerro

- National Synchrotron Light Source (NSLS), Brookhaven National Laboratory (BNL), New York. 28 Marzo -5 Abril.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Francia). 13-16 Mayo y 29 Noviembre-4 Diciembre.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 8-11 Septiembre.

Daniel R. Rueda

- National Synchrotron Light Source (NSLS), Brookhaven National Laboratory (BNL), New York. 28 Marzo-5 Abril.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Francia). 13-16 Mayo.

M^a Esperanza Caglio

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 20-24 Octubre.

Fernando Ania

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 9-15 Junio y 19-24 Octubre.

M^a José Capitán

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 6-16 Marzo; 18-21 Septiembre y 16-25 Octubre.

Araceli Flores

- European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble (Francia). 9-14 Febrero.
- Instituto de Procesos Físico-Químicos, CNR, Messina (Italia). 7-13 Abril.

M^a Cruz García Gutiérrez

- National Synchrotron Light Source (NSLS), Brookhaven National Laboratory (BNL), New York. 28 Marzo-5 Abril.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Francia). 19-25 Abril; 13-16 Mayo; 12-19 Junio.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 8-11 Septiembre.

Aurora Nogales

- National Synchrotron Light Source (NSLS), Brookhaven National Laboratory (BNL), New York. 28 Marzo-5 Abril.
- Institute Laue-Langevin (ILL), Grenoble (Francia). 1-5 Julio.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Francia). 25-29 Agosto y 29 Noviembre-6 Diciembre.

Juan Francisco Vega

- Grupo de Reología Experimental y Computacional, Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Tecnológica de Eindhoven (Holanda), 17-23 de Enero 2005

Jaime J. Hernández Rueda

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Francia). 12-18 Junio y 26-29 Agosto
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 8-11 Septiembre.

Sonia Martínez Hedo

- Universidad Emory, Atlanta, USA. 25 de Agosto al 25 de Octubre (Becada por el MEC).

Inés Puente Orench

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 10-15 Junio.
- Institut für Technische und Makromolekulare Chemis, Universität Hamburg. 15 Junio-16 Agosto.

Alejandro Sanz Parras

- Institute Laue-Langevin (ILL), Grenoble (Francia). 10-14 Marzo.
- National Synchrotron Light Source (NSLS), Brookhaven National Laboratory (BNL), New York. 28 Marzo-5 Abril.

Capítulo 5

ACTIVIDAD DOCENTE Y OTRAS

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Universidad Autónoma de Madrid. Curso de doctorado de Física de la Materia Condensada con mención de Calidad por el MEC. Responsable: Miguel Angel Ramos

Física de vidrios, sólidos amorfos y cristales desordenados (1 crédito), M.J. Capitán

Universidad Autónoma de Madrid. Curso de doctorado de Física de la Materia Condensada con mención de Calidad por el MEC. Responsable: Juan José de Miguel

Autoensamblaje y autoorganización: sistemas moleculares (1 crédito), M.J. Capitán

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

- Micromechanical properties of polymers and blends relating to nanostructure and morphology. Instituto de Procesos Físico-Químicos, CNR, Messina (Italia), 5 Abril.
- New advances in micromechanical properties of polymers relating to nanostructure and morphology. Kyoto University, Kyoto (Japón), 31 Mayo.
- New advances in micromechanical properties of polymers relating to nanostructure and morphology, Tokyo Institute of Technology, Tokyo (Japón), 3 Junio.
- Zerstörungsfreie Micromechanische Messungen in Kleinen Materialbereichen: Mikrohärte Bestimmung an Polymerwerkstoffen. Martin-Luther-Universität, Halle (Alemania), 24 Noviembre.

Javier Martínez de Salazar

- Las nuevas pliolefinas y su contribución al avance del conocimiento en la física de polímeros. UNED, Madrid, 19 Mayo

Tiberio A. Ezquerro

- Profesor del Curso: “Estudio de morfología de polímeros por medio de sincrotrón de rayos X y métodos combinados”, Escuela en Ciencia e Ingeniería de Materiales en la Universidad Autónoma de México, México, 26 Junio-3 Julio.

M^a José Capitán Aranda

- Synchrotron light as a powerful tool for materials analysis. XII International Summer School. Organizado por el Instituto Nicolás Cabrera-UAM. Responsable: L. Soriano E.G. Michel. Participación en el Comité Científico Organizador. Septiembre 2005.
- Principios y aplicaciones de la difracción de rayos X en superficies. Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC, 28 Octubre.
- Técnicas de caracterización mediante radiación sincrotrón. Curso de post-grado y especialización. Organizado por el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC. Responsable: A. Caballero y A. Muñoz Paez. Octubre 2005.

Mari Cruz García Gutiérrez

- Difracción de rayos X a bajo y alto ángulo aplicada al estudio de la materia condensada blanda. Curso de verano “La radiación sincrotrón: un desafío para la ciencia del siglo XXI” Universidad Internacional de Andalucía, sede Antonio Machado, Baeza. 1-5 de Agosto.
- La microdifracción de rayos X como herramienta para el estudio de la estructura y propiedades de sistemas poliméricos. Curso de verano “La radiación sincrotrón: un desafío para la ciencia del siglo XXI” Universidad Internacional de Andalucía, sede Antonio Machado, Baeza. 1-5 de Agosto.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Mari Cruz García Gutiérrez

- La luz sincrotrón como herramienta para el estudio de procesos estructurales y dinámicos en polímeros. II Curso de iniciación a la investigación en Estructura de la Materia: Desde las partículas subatómicas a los compuestos moleculares. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid, Marzo 2005.

Juan Francisco Vega

- Polímeros de cadena flexible: la red de enmarañamientos en fluidos complejos nanoestructurados. Centro de Física “Miguel A: Catalán”, Madrid, 3 de Marzo.
- Viscoelasticidad: la memoria de los polímeros. II Curso de Iniciación en la Investigación en Estructura de la Materia: Desde las Partículas Sub-atómicas a los Compuestos Moleculares. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), 16-18 Marzo 2005, Madrid

Victor Cruz.

- Nanotechnology Forum. CSIC, Madrid, 20 de Octubre de 2005

Inés Puente Orench

- Estructura y propiedades de multicapas poliméricas de PET/PC, Centro de Física Miguel A. Catalán, Madrid, 12 Diciembre.

Mari Cruz García-Gutiérrez, Tiberio A. Ezquerro Sanz y Daniel R. Rueda

Comité organizador del Workshop: Applications of Synchrotron Light to Non-crystalline diffraction in Materials and Life Sciences, IEM, Madrid, 24 y 25 Noviembre 2005



Conferencias:

A. Flores, F. Ania, F.J. Baltá Calleja

- Synchrotron radiation studies of induced orientation in a liquid crystalline polyester under the influence of a magnetic field

Aurora Nogales

- Structural evolution in polymers during drawing deformation by in situ SAXS and WAXS"

Wojciech Pisula, Marcel Kastler, Daniel Wassenfaller, Mari Cruz García-Gutiérrez, Richard Davies, Christian Riekell, Klaus Müllen

- Investigation of the Supramolecular Arrangement of Discotic Hexa-*peri*-hexabenzocoronenes on Surfaces

Asistencia:

Jaime Hernández Rueda

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

- Miembro del nuevo comité: “PHOTON SCIENCE COMMITTEE” (PSC) que incluye las actividades de las siguientes instalaciones: Anillo de almacenamiento DORIS III, Anillo de almacenamiento PETRA III, Láser de electrones libres en ultravioleta y Láser de electrones libres europeo. DESY, Alemania, 2004-2005
- Premio Internacional de la Sociedad de Ciencia de Polímeros de Japón. The Society of Polymer Science, Japan (SPSJ), Yokohama (Japón), 26 Mayo 2005
- Cruz Oficial de la Orden al Mérito de la República de Polonia concedida por el Presidente de la República de Polonia, 12 Julio 2005

Javier Martínez de Salazar

- Miembro del Comité ‘Executive Board of the European Polymer Federation’, European Science Foundation, desde marzo 1996-hasta la fecha
- Miembro del Consejo Rector del CSIC, Ministerio de Ciencia y Tecnología, desde Marzo 1999-hasta la fecha
- Miembro del Comité Científico del European Polymer Congress 2005, Moscú (Rusia), 27 Junio-1 Julio
- Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral: “Cristalización y transporte de gases en mezclas de polipropileno isotáctico con un polímeros de cristal líquido”, de D. Fco. Javier Torre Gurutzalde, Facultad de Químicas. Universidad del País Vasco, abril 2005
- Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral: “Influencia de la oxidación, la irradiación y los tratamientos térmicos en la microestructura y propiedades mecánicas del polietileno de ultra alto peso molecular de uso en prótesis articulares”, de D. Fco. Javier Medel Rezusta, Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza, septiembre, 2005

Tiberio A. Ezquerro

- Miembro del Subcommittee on “Soft Condensed Matter and Biological Materials”, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) Grenoble, Francia, 2003-2005
- Miembro del Scientific Advisory Committee (SAC) del Sincrotrón SOLEIL, Francia. Diciembre 2005-Diciembre 2007.
- Miembro del International Scientific Committee “Carbon nanotube(CNT) Polymer Composites International Conference”, Hamburg, Alemania. 4-7 de Septiembre 2005,

M^a José Capitán Aranda

- Vocal del Órgano de Selección 1 B, Área 1: ‘Informática, electrónica y mantenimiento’ en el Concurso de 280 contratos de Personal Técnico de Investigación en el Marco del Proyecto I3P, cofinanciado por el Fondo Social Europeo, CSIC, Duración del Concurso
- Representante español en el Comité ISOLDE (CERN, Suiza). 2003-2005

Victor Cruz

- Coordinador para el CSIC en el “Nanotechnology Consortium”

Juan Francisco Vega

- Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral:"Ultra high molecular weight polyethylene from new single-site catalysts systems" de Ms Kirity S. Garkhail. Departamento de Ingeniería Química, Universidad tecnológica de Eindhoven (Holanda), Enero 2005.

M^a Cruz García Gutiérrez

- Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral:"Interacción entre nanoestructura y dinámica en materia condensada blanda: Polímeros frente a compuestos de bajo peso molecular" de D Alejandro Sanz Parras. Departamento de Química Física, Universidad de Alcalá, Diciembre 2005.

Jaime J. Hernández Rueda

- Premio al mejor poster presentado en la II Reunión de la Asociación Española de Usuarios de Radiación Síncrotrón – AUSE, San Lorenzo de El Escorial (Madrid). 28-30 Septiembre

Alejandro Sanz,

A. Nogales y

T.A. Ezquerria

- Scientific highlight, Institut Laue Langevin (Grenoble, Francia). Annual Report 2004. Hydrogen-bond network breakage as a first step to isopropanol crystallization.. <http://www.ill.fr/AR-04/index.html>, mayo de 2005

Capítulo 6

PUBLICACIONES

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

S. Henning, G.H. Michler, F. Ania, F.J. Baltá Calleja: Microhardness of α - and β -modified isotactic polypropylene at the initial stages of deformation: Analysis of micromechanical processes. *Colloid & Polym. Sci.*, 283(5), 486-495 (2005).

M. Boyanova, F. J. Baltá Calleja, S. Fakirov, I. Kuehnert, G. Mennig: Influence of processing conditions on the weld line in doubly injection-molded glassy polycarbonate and polystyrene: Microindentation hardness study. *Advances in Polymer Technology* 24(1), 14-20 (2005).

R. Adhikari, R. Godehardt, W. Lebek, S. Frangov, G.H. Michler, H.-J. Radusch, F.J. Baltá Calleja: Morphology and micromechanical properties of ethylene/1-octene copolymers and their blends with high density polyethylene. *Polymers for Advanced Technologies*, 16, 156-166 (2005).

R. Adhikari, M. Buschnakowski, W. Lebek, R. Godehardt, G.H. Michler, F.J. Baltá Calleja, K. Knoll: Asymmetric PS-*block*-(PS-co-PB)-*block*-PS block copolymers: Morphology and deformation behavior of star block copolymer/PS blends. *Polymers for Advanced Technologies*, 16, 175-182 (2005).

F. J. Baltá Calleja, F. Ania, I. Puente Orench, E. Baer, A. Hiltner, T. Bernal, S.S. Funari: Nanostructure development in multilayered polymer systems as revealed by X-ray scattering methods. *Progress in Colloid and Polymer Sci.*, 130, 140-148 (2005).

R.K. Bayer, F.J. Baltá Calleja: Comment on the structure of amorphous starch as derived from precursors of crystallization: the role of the entanglement network. *J. Macromol. Sci.-Phys.*, 44(4), 471-479 (2005).

A. Flores, M. Pieruccini, N. Striebeck, S.S. Funari, E. Bosch, F.J. Baltá Calleja Structure formation in poly(ethylene terephthalate) upon annealing as revealed by microindentation hardness and X-ray scattering. *Polymer*, 46, 9404-9410 (2005).

J.J.M. Ramos, N.T. Correia, H.P., Diogo, C. Alvarez, T.A. Ezquerra: Slow relaxations in salicylsalicylic acid studied by dielectric techniques. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 351(46-48), 3600-3606 (2005)

M. Jimenez-Ruiz, A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra: Experimental setup for simultaneous measurements of neutron diffraction and dielectric spectroscopy during crystallization of liquids. *Review of Scientific Instruments* 76 (4): Art. No. 043901 (2005).

C. Álvarez, A. Nogales, M.C. García-Gutiérrez, A. Sanz, Z. Denchev, S.S. Funari, M. Bruix, T.A. Ezquerra. Confined crystallization in phase-separated Poly(ethylene terephthalate)/Poly(ethylene naphthalene 2,6- dicarboxilate) blends. *Eur. Phys J. E: Soft Condensed Matter* 18, 459-465 (2005)

A. Sanz, D. R. Rueda, A. Nogales, M. Jiménez-Ruiz, T. A. Ezquerra Molecular dynamics in crystalline acetone studied by dielectric spectroscopy and neutron diffraction. *Physica B.* 370, 22-28 (2005)

T. A. Ezquerra, A. Martínez-Gómez, C. Álvarez, E. Alonso, A. Sanz, M. C. García-Gutierrez, A. Bello, E. Pérez, S. S. Funari y M. Dommach. "Structure-Dynamics relationships during the amorphous to smectic transition of a main chain liquid crystalline polymer". *Journal of Non Crystalline Solids.* 351, 2768-2772 (2005)

M. Rittner, M.S. Martín-González, A. Flores, H. Schweizer, F. Effenberg, M.H. Pilkuhn: Nanostructural and electrical properties of functionally terminated self-assembled monolayers on silicon surfaces. *J. Appl. Phys.* 98, Art. No. 054312 (2005).

A. Gourrier, M.C. García Gutiérrez, C. Riekel: Investigation of the Structural Deformation Mechanisms Induced by Microindentation in a Thermotropic Liquid Crystalline Copolyester Using Synchrotron X-ray Microdiffraction. *Macromolecules*, 38(9), 3838-3844 (2005)

A. Nogales, G.R. Mitchell: Development of highly oriented polymer crystals from row assemblies. *Polymer*, 46, 5615-5620 (2005)

M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, C. Domingo, J.V. García-Ramos, T.A. Ezquerra: Shear-induced self-assembly of single-wall carbon nanotubes in a polymer-nanocomposite: Templating of crystallization. *Polymeric Materials: Science and Engineering*, 93, 47 (2005).

J. Ramos, A. Muñoz-Escalona, S. Martínez, J. Martínez-Salazar, V. Cruz: Ethylene-styrene copolymerization with constrained geometry catalysts. A Density Functional Study. *J. Chem. Phys.* 122, 74901 (2005).

S. Martínez, M. T. Expósito, J. Ramos, V. Cruz, M. C. Martínez, A. Muñoz-Escalona, J. Martínez-Salazar: An experimental and computational evaluation of ethylene/styrene copolymerisation using a homogeneous single-site titanium (IV)-constrained geometry catalyst. *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. Ed.* 43, 711-725 (2005)

M. Aguilar, S. Martín, J.F. Vega, A. Muñoz-Escalona, J. Martínez-Salazar: Improving the Processability of a Metallocene-catalysed Linear PE by Blending with a Small Amount of UHMWPE. *J. Polym. Sci. Polym. Phys. Ed.* 43, 2963-2971 (2005)

V.L. Cruz, J. Ramos, S. Martinez, A. Munoz-Escalona, J. Martinez-Salazar: Structure-Activity Relationship Study of the Metallocene Catalyst Activity in Ethylene Polymerization. *Organometallics*, 24, 5095-5102 (2005).

6.2 LIBROS Y MONOGRAFÍAS

6.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

G.H. Michler and F.J. Baltá Calleja (Eds.): **Mechanical Properties of Polymers based on Nanostructure and Morphology**, Taylor and Francis, Inc., Boca Ratón, (FL), 2005, pp. 1-757. ISBN: 1-57444-771-8.

F.J. Baltá Calleja, A. Flores, F. Ania. "Micro-indentation studies of polymers relating to nanostructure and morphology" en **Mechanical Properties of Polymers based on Nanostructure and Morphology**, G.H. Michler and F.J. Baltá Calleja (Eds.); Taylor and Francis, Inc., Boca Ratón (FL), 2005, Chap. 8, pp. 279-315. ISBN: 1-57444-771-8.

T.A. Ezquerra: "Dielectric Relaxation of Polyester-Based Thermoplastic Elastomers" en **Handbook of Condensation Thermoplastic Elastomers**, S. Fakirov (Ed.), Wiley-VCH, Weinheim, 2005. ISBN: 978-3-527-30976-4

M.C. García Gutiérrez, O. López Serrano, A. Nogales, T.A. Ezquerra: "Proposal for a beamline on Non Crystalline Diffraction for Life and Material Sciences with Modular Microfocus on ALBA", **Beamline proposals for ALBA**, CELLS (Eds.); Barcelona. 2005, Vol. 1, Chap. 4, pp. 1-79.

C. Fonseca, A. Ochoa, M.F. Mina, C. González, P. Cardin, F. Ania: "Determinación del estado de orientación en compuestos de PE con fibras de celulosa mediante medidas de microdureza" en **Actas del VI Congreso Nacional de Materiales Compuestos**, Universidad del País Valenciano, Valencia, 2005, pp. 171-178. ISBN: 84-9705-821-6.

6.3 TESIS DOCTORALES

6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Estructura y propiedades de copolímeros de etileno/1-hexeno obtenidos mediante catalizadores de centro activo único. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 17 Enero 2005. Sobresaliente “cum laude”

Doctorando/a: **Sandra Martín Rauseo**

Directores: **J. Martínez-Salazar y J.F. Vega**

Interrelación entre nanoestructura y dinámica en materia condensada blanda: polímeros frente a compuestos de bajo peso molecular. Facultad de Química, Universidad de Alcalá, 14 Diciembre 2005. Sobresaliente “cum laude”

Doctorando: **Alejandro Sanz Parras**

Directores: **T.A. Ezquerro y A. Nogales**

6.4 TESINAS DE LICENCIATURA

6.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Síntesis y Caracterización de Materiales Compuestos Basados en Poliolefinas Metalocénicas y Caucho Reciclado. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 8 de julio. Sobresaliente

Tesinanda: **María Teresa Expósito Espinosa**

Directores: **J. Ramos Díaz y J.F. Vega**