

MEMORIA 2007 - IEM

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

MACROMOLECULAR

CAPÍTULO 1: ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del Departamento:

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Dr. Francisco José Baltá Calleja

Profesor de Investigación (vinculado ad honorem)

Dr. Javier Martínez de Salazar Bascañana

Profesor de Investigación

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular

Dra. María Esperanza Cagiao Escotado

Científica Titular

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científica Titular

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científica Titular

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Contratada(R&C). Científico Titular (desde 7/2007)

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Investigadora Contratada (R&C)

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Investigador Contratado (R&C desde 11/ 2007)

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado (I3P)

Dra. M^a Teresa Expósito Espinosa

Becaria Predoctoral FPI (hasta 30 abril)

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Becario Predoctoral (FPI)

D. Jon Otegui de la Fuente

Contratado I3P de Postgrado

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Contratada I3P de Postgrado

Personal de apoyo:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado

Dña. Ana M. Montero Cuéllar

Ayudante de Investigación

CAPÍTULO 2: LABOR INVESTIGADORA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- 1. Simulación de reacciones de polimerización y de propiedades físicas de polímeros.**
- 2. Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.**
- 3. Física de polímeros: Movilidad y orden en sistemas macromoleculares.**
- 4. Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.**
- 5. Intercaras**

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.**
- Primeros estadios de la cristalización de polímeros sometidos a campos de deformación de tipo cizalla.**
- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).**
- Desarrollo de la estructura y propiedades de polímeros naturales y nanocompuestos.**
- Procesos de recristalización en sistemas semirígidos.**
- Fenómenos de precristalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.**
- Síntesis de poliolefinas funcionalizadas**
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos**
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular**
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades**
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.**
- Procesos de extrusión en mezclas de poliolefinas**
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas**
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica**
- Biofísica**

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- **Difracción de rayos-X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS) ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GIXS), incluyendo el uso de de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.**
- **Micro- y ultramicro-durómetro**
- **Calorimetría diferencial de barrido**
- **Dispersión de neutrones**
- **Espectroscopía dieléctrica de banda ancha**
- **Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua**
- **Reometría de extrusión capilar**
- **Análisis dinamo-mecánico en flexión**
- **Análisis mecánico en tracción: módulo elástico**
- **Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización**
- **Microscopía óptica y de fuerzas atómicas (AFM)**
- **GPC y dispersor de luz multiángulo a alta temperatura**

LABOR INVESTIGADORA

Grupo de Estructura Molecular y Propiedades de Polímeros

(proyecto COMOCOMO)

Estudio de las propiedades físicas de modelos moleculares: estructura del catalizador y topología molecular

En el marco del proyecto financiado por la Comunidad de Madrid (COMOCOMO) se ha realizado un estudio básico de las propiedades viscoelásticas del fundido en el régimen lineal en nuevos modelos moleculares obtenidos mediante catalizadores de centro activo único (Universidad Rey Juan Carlos, Universidad de Alcalá y Universidad de Sevilla).

Entre los aspectos más novedosos de los resultados obtenidos hay que destacar la validez de estos materiales como polímeros modelo a la hora de establecer la dependencia de las propiedades viscoelásticas y las características estructurales y moleculares a nivel microscópico. Uno de los resultados más interesantes en este aspecto ha sido el establecimiento, a través de las medidas viscoelásticas, de una clara diferencia en cuanto a la arquitectura molecular entre los polímeros obtenidos mediante distintos catalizadores, lo que ha permitido establecer correlaciones entre la arquitectura molecular de los polímeros obtenidos y la estructura de los catalizadores. Los diversos catalizadores seleccionados presentan distinta habilidad en cuanto a la incorporación de ramificaciones de cadena larga en los polímeros sintetizados. Mientras que los polímeros obtenidos mediante catalizadores no sustituidos o con ligandos extremadamente voluminosos dan lugar a polímeros con la huella característica de materiales con pocas ramificaciones de cadena larga, aquellos con ligandos menos voluminosos generan poliolefinas con la huella viscoelástica característica de poliolefinas de peso molecular ultra-alto. Finalmente los catalizadores tipo ansa-metaloceno dan lugar a materiales de topología más compleja.

Alternativamente a la tecnología de los catalizadores de metaloceno, se han desarrollado en los últimos años otro tipo de catalizadores, derivados de α -diiminas de Ni and Pd, que suponen otra ruta para la obtención de polímeros ramificados sin la necesidad de la adición de comonómeros, y que también pueden incorporar ramificaciones de cadena larga. Con catalizadores de Ni se han obtenido PE con diferente densidad de ramificaciones cortas (desde metilo hasta hexilo). Los catalizadores de Pd pueden controlar la topología de las cadenas, de manera que se obtienen tanto estructuras con muy pocas ramificaciones de cadena larga como estructuras hiperamificadas o dendríticas. La colaboración con la Universidad de Sevilla se ha centrado en el estudio de este tipo de materiales y en la posibilidad de copolimerizar etileno con monómeros polares como el acrilato de metilo. El introducir de manera precisa

en las poliolefinas grupos polares y funcionales está atrayendo considerable atención, ya que puede dar lugar a propiedades específicas como mejora de la procesabilidad, adhesión y compatibilidad con otros materiales, e incluso, con sistemas biológicos.

(proyecto CICYT MAT2006-0400)

Simulación Monte Carlo del efecto de la ramificación de cadena corta en poliolefinas en el estado fundido

En este estudio se han simulado usando métodos avanzados Monte Carlo en combinación con dinámica molecular (MD) cadenas largas de polietileno C_{1000} (1000 unidades de carbono en la cadena principal) conteniendo diferente grado de ramificación en el rango de 0 y 115 ramificaciones C_4 . Los movimientos de MC usados en este estudio tuvieron que ser programados específicamente para tener en cuenta la ramificación de cadena corta en los modelos. Así, se han propuesto nuevos movimientos MC tales como el SCB-EB (SCB end-bridge), el SCB-CONROT (SCB concerted rotation) y br-CBMC (branch point configurational bias Monte Carlo move).

El resultado de la simulación conduce a los siguientes resultados: a) La presencia de ramificación de cadena corta altera la distribución trans/gauche de los enlaces. A medida que el número de ramificaciones aumenta, la población de estados en trans disminuye. Como consecuencia de esto, el tamaño de las cadenas disminuye alcanzando un valor "plateau" para los sistemas más ramificados aquí estudiados; b) el empaquetamiento local del fundido se ve afectado por el número de ramificaciones cortas. De este modo, al aumentar el grado de ramificación la densidad local aumenta y por lo tanto el empaquetamiento de cadenas en el fundido es más difícil; c) La longitud de empaquetamiento (l_p) y el peso molecular entre enmarañamientos (M_e) aumentan con el grado de ramificación. Estos resultados en consonancia con los resultados experimentales realizados en nuestro propio grupo y en otros laboratorios líderes en copolímeros de poliolefinas.

Simulación y experimentos para la obtención del tiempo de relajación de enmarañamientos en polietileno

La combinación de técnicas de simulación avanzadas para obtener propiedades tales como el M_e y τ_e (inaccesibles de forma experimental), junto con la aplicación de modelos topológicos de reptación, ha permitido explicar las huellas viscoelásticas de un conjunto de PE lineales sin utilizar ningún parámetro ajustable. Las simulaciones por ordenador han revelado por primera vez el valor del tiempo característico entre enmarañamientos τ_e el cual es experimentalmente inaccesible. También, se han encontrado inconsistencias entre los valores de M_e y G_N^0 en la ecuación de Doi-Edwards ($G_N^0 = K \rho RT / M_e$). De esta manera, el resultado aquí obtenido apunta hacia un valor del prefactor K , en torno a 0.6, diferente al clásico 4/5 propuestos por Doi-Edwards. Esto implica un nuevo paso para el desarrollo de modelos teóricos de reptación.

Simulación estocástica de los procesos de nucleación tempranos en polietileno

Se han obtenido nuevos resultados procedentes de la simulación de dinámica molecular de Langevin de modelos de polietileno lineales y ramificados relacionados con el mecanismo molecular involucrado en la formación de estructuras ordenadas en las primeras etapas del proceso de cristalización.

Algunos resultados importantes son: i) La temperatura de fusión en equilibrio disminuye con el aumento de ramificación del polímero, en coincidencia con la evidencia experimental. ii) Se observan tres regiones en las primeras etapas de nucleación. La región I corresponde a estructuras en ovillo estadístico sin ningún orden. A medida que el tiempo evoluciona esta estructura forma pequeños núcleos de cristalización unidos mediante material amorfo. La región III corresponde a una coalescencia de estos núcleos en una estructura formando lámelas ordenadas. Se ha encontrado una relación lineal entre la temperatura y la pendiente de la región I (K), además el valor extrapolado a $K=0$ corresponde a la temperatura de fusión en equilibrio de un estado conformacional que se encuentra fluctuando en un ovillo estadístico (sin orden). iii) El análisis conformacional de la dinámica muestra que el mecanismo de plegado es dependiente del grado de ramificación, observándose que la ramificación se coloca en la superficie de la estructura lamelar. iv) El estudio de la temperatura de fusión en equilibrio en función de la fracción molar de comonomero indica que tanto resultados experimentales y teóricos muestran divergencia con el clásico modelo de exclusión de Flory.

Estudio de la relación entre la estructura del catalizador y la arquitectura molecular de copolímeros polares

Con el apoyo de las investigaciones que se realizan en el grupo acerca de la simulación por ordenador de la habilidad de los catalizadores de centro activo único para generar poliolefinas de arquitectura controlada, y mediante la síntesis de nuevos materiales (a través de la cooperación con Repsol-YPF), se ha llevado a cabo el estudio de la relación entre la arquitectura molecular y las propiedades de los polímeros obtenidos mediante los catalizadores [*rac*-ethylene(Ind)₂ZrCl₂] and [*rac*-ethylene(H₄Ind)₂ZrCl₂], y [norbornane(Ind)₂TiCl₂]. Los resultados de este trabajo indican claramente que la estructura del catalizador juega un papel importantísimo en la copolimerización (actividad y habilidad para incorporar comonómeros). Para ambientes estéricos similares alrededor del centro metálico del catalizador, un cambio en las características electrónicas de los ligandos produce importantes variaciones en la inserción del comonómero polar. Cuando la estructura química de los complejos catalíticos es la misma, la disposición de los ligandos (meso *versus* rac) puede provocar que las especies sean activas o no en presencia del comonómero. Además la longitud del puente (uno o dos átomos de carbono) y el tipo de metal (zirconio o titanio) modula la capacidad del catalizador para polimerizar. La longitud del comonómero juega también su papel, ya que mayores comonómeros se incorporan más fácilmente en la cadena en crecimiento. En cualquier caso, los precursores de zirconoceno se han manifestado como los más interesantes para obtener copolímeros de etileno/alcohol, con incorporaciones de hasta el 25 % en peso, raramente observada en la literatura.

En cuanto al desarrollo de nuevos materiales bimodales procesables y con propiedades específicas se han estudiado diversas familias de polietilenos, obtenidos mediante un novedoso proceso de catálisis dual que supone el uso de una mezcla de sistemas catalíticos: un catalizador metalocénico, que polimeriza, en principio, cadenas de etileno y α -olefinas de alto peso molecular, y un catalizador post-metaloceno, que genera especies etilénicas lineales de bajo peso molecular. El objetivo es generar ambas especies moleculares en un mismo reactor, de manera que ambas se encuentran íntimamente mezcladas, con lo que no es necesario el proceso ulterior de mezclado (habitual en los procesos industriales para generar este tipo de materiales). Los resultados ponen de manifiesto la posibilidad de generar una gran variedad de materiales (de distinta densidad, cristalinidad y módulo elástico) a través de la variación de la proporción de las especies catalíticas en el proceso de polimerización. Se ha observado, sin embargo, que los materiales presentan arquitecturas moleculares muy complejas, que derivan finalmente en problemas de procesado, y que probablemente se deben a un efecto "tandem". Este fenómeno implica que las especies de bajo peso molecular generadas por la especie post-metalocénica se incorporan al proceso de polimerización en los centros activos metalocénicos, dando lugar a estructuras ramificadas extremadamente complejas. El siguiente paso será el estudio de las variables de polimerización que eviten la presencia de este tipo de estructuras, que, como se ha comentado en líneas anteriores, se deben fundamentalmente a la estructura del catalizador utilizado.

Propiedades de sistemas compuestos de poliolefina y nanotubos de carbono (Colaboración USB)

En colaboración con la Universidad Simón Bolívar se está estudiando la morfología, las propiedades térmicas, mecánicas y reológicas de una serie de mezclas de polietileno y CNT obtenidos mediante esta metodología, así como de sistemas formados por polietileno convencional y pequeñas cantidades (en torno al 1 %) de dichas mezclas generadas "in situ". Los resultados preliminares obtenidos para las propiedades en fundido es bastante inusual, aunque se ha observado recientemente en el caso del polietileno de peso molecular ultra-alto. Para los contenidos estudiados se produce una disminución de la viscosidad y del módulo elástico con respecto a la del polímero base, que se podría atribuir a la adsorción selectiva de las especies de mayor tiempo de relajación sobre la superficie de los nanotubos. Esto tiene grandes implicaciones, ya provoca una mejora de la procesabilidad en extrusión, que se manifiesta como una disminución del esfuerzo aplicado y en un retraso de los regímenes de distorsión, aunque, por otro lado supone una disminución en la viscosidad elongacional y en la resistencia del fundido (una variable importante en los procesos de estirado y fabricación de films).

(proyecto de cooperación hispano-chileno 2006-2007)

Análisis de la reactividad de catalizadores postmetalocénicos como catalizadores para polimerización de olefinas

Los catalizadores basados en complejos de hierro con ligandos bis(imino)piridina han demostrado un excelente rendimiento en la polimerización de olefinas. Sin embargo, existe una amplia controversia acerca de la naturaleza de la especie activa responsable del proceso catalítico. Una de las más vivas polémicas surge en la asignación del estado de oxidación de la especie activa, reportándose unos

experimentos que indican un estado de oxidación 3 para el hierro y otros que indican un estado de oxidación 2 para dicho metal.

Con objeto de arrojar luz sobre dicha cuestión, hemos realizado un análisis de la estructura molecular de ambos complejos siguiendo los modelos sugeridos por la denominada Teoría de Funcionales de la Densidad Conceptual. En dicha metodología se describe la reactividad molecular en terminos de conceptos químicos derivados matemáticamente de la Teoría de Funcionales de la Densidad. Los resultados indican que la especie mas adecuada para la polimerización de olefinas es la correspondiente a Fe(III), aunque la especie con estado de oxidación más bajo es también reactiva, siempre y cuando este asociada a la presencia del cocatalizador. Estos resultados concuerdan con los datos experimentales que sugieren una presencia de más de una especie activa de distinta naturaleza y que la presencia del cocatalizador en la especie activa es esencial.

Colaboración con la industria: nuevos materiales con propiedades específicas de uso

Se ha continuado con la colaboración con la industria, concretamente con dos empresas del sector de los materiales poliméricos: Dow Chemicals y Repsol-YPF. En este contexto se han desarrollado actividades de investigación para la transferencia de conocimiento en el desarrollo de nuevos materiales de base olefínica con propiedades específicas, en las que han estado involucrados dos estudiantes de post-grado (Jon Otegui de la Fuente y Nuria Robledo Alvaro). La investigación pretende cubrir dos objetivos específicos: por un lado el diseño de un material capaz de resistir las altas presiones en grandes colectores de gas y por otro optimizar las propiedades ópticas y mecánicas de películas biorientadas.

La aproximación a estos problemas se ha llevado a cabo desde dos vertientes, dependiendo de los intereses de las empresas involucradas. Por un lado desde el estudio de sistemas poliméricos formados por dos especies moleculares distintas obtenidas en un único reactor, en contraposición a los modelos estudiados con anterioridad y que estaban constituidos por mezclas físicas de ambos componentes; y por otro desde el estudio de mezclas de polímeros de distinta arquitectura molecular con objeto de ajustar determinadas propiedades, muy dependientes de la interacción entre los componentes de la mezcla, y que son clave en la producción de películas finas.

Estudios mecanísticos sobre catalizadores metalocénicos

Ensayos de polimerización realizados en los laboratorios de Repsol con catalizadores zirconocenos alquil substituidos en los ligandos aromáticos muestran un descenso en el peso molecular del polímero obtenido con substituyentes propilo o superiores en posición 3 de dicho ligando. El estudio teórico comparativo de dichos catalizadores no arroja ninguna diferencia significativa en los perfiles de energía potencial para los procesos de inserción, propagación de cadena y las reacciones de terminación más probables como β -transferencia al monómero y β -eliminación. Sin embargo, un análisis conformacional de las estructuras con cadenas alquílicas muestra que los complejos conteniendo substituyentes propilo o superior pueden presentar interacción agóstica intramolecular entre un H del substituyente alquilo y el metal. Hemos demostrado que dicha interacción puede conducir a una reacción de terminación de polimerización por transferencia a la cadena creciente, constituyéndose en un mecanismo de terminación adicional a los ya conocidos y que permite explicar el comportamiento experimental observado.

Por otra parte, se ha analizado el origen de la inactividad de catalizadores bis-ciclopentadienil zirconocenos con polisustitución en uno de los ligandos ciclopentadienilo por grupos arilo. Los cálculos teóricos muestran que la congestión estérica conferida por dichos substituyentes voluminosos impiden la aproximación del cocatalizador que genera la vacante adecuada en el centro activo y por tanto, la activación del catalizador. Este estudio ha sido llevado a cabo en colaboración con el grupo del Prof. Mariano Fajardo de la Universidad Rey Juan Carlos de Madrid.

Grupo de Física de la Materia Blanda y Polimérica

1. 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 y del “European Radiation Synchrotron Facility (ESRF)” de Grenoble, Francia. En particular hemos investigado el ordenamiento cristalino en muestras de polipropileno adipato (PPA) y

polypropilensucinato (PPS) en un amplio espectro de frecuencias. Los resultados obtenidos han contribuido a esclarecer el mecanismo de nucleación cristalina en materiales poliméricos.

2. Cristalización de polímeros controlada mediante plantillas nanoestructuradas de nanotubos de carbono y nanographenos.

En colaboración con científicos del Max-Planck Institut de Maguncia, Alemania, y mediante difracción de rayos X con técnicas de microfoco y microscopía de fuerzas atómicas (AFM) se ha caracterizado el desarrollo de estructuras organizadas en diferentes polímeros controladas por plantillas carbonáceas. La implicación de este fenómeno en la obtención de nanoestructuras poliméricas definidas está siendo explotada en otros sistemas basados en nanotubos de carbono de diferente naturaleza.

3. Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

Continuando la actividad de nuestro grupo en sistemas con nanotubos de carbono se ha investigado la estructura, las propiedades eléctricas, de transparencia y mecánicas de nanocomposites inyectados en molde basados en nanotubos de carbono de pared simple (“Single Wall Carbon Nanotubes”, SWCNT) mezclados con politereftalato de butileno (PBT) y con polietilen-tereftalato (PET). Se ha puesto de manifiesto, mediante medidas de difracción de rayos X durante experimentos de estiramiento, el mecanismo de deformación y ruptura de nanocomposites poliméricas con nanotubos de carbono. Así mismo se ha logrado, mediante experimentos simultáneos de reología y dispersión de rayos X a bajo ángulo, poner de manifiesto la influencia de la cizalla en los fenómenos de orientación y por tanto en las propiedades mecánicas de este tipo de nanocomposites.

4. Dinámica molecular en sistemas amorfos

En colaboración con el Dra. Nadia Lotti de la Universidad de Bolonia, Italia, 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 distintos poliésteres aromáticos de interés tecnológico. Mediante un preciso control de la síntesis química se ha logrado introducir diversos hetero-átomos que pueden actuar como “marcas dieléctricas”. Estas investigaciones están permitiendo establecer una posible relación entre la dinámica local, que aparece por debajo de la temperatura de transición vítrea, y la dinámica segmental. De esta interrelación hemos puesto en evidencia la naturaleza de los movimientos moleculares en el estado vítreo.

5. Materiales poliméricos con propiedades avanzadas

Dentro de este capítulo nuestro grupo, en colaboración con los grupos de síntesis del Instituto Max-Planck de Maguncia (Prof. K. Müllen) y de la Universidad Autónoma de Méjico (Prof. M. Zolotukhin), ha investigado nuevos sistemas poliméricos encaminados a mejorar las propiedades de conducción electrónica mediante el auto-ensamblaje controlado de las unidades moleculares constitutivas del polímero. En este sentido se han investigado diferentes sistemas polimérico basados en sistemas con estructuras discóticas que incluyen éter-coronas y hexa-peri-hexabenzocoronenos. En particular hemos sido capaces de preparar películas delgadas de estos materiales (“nanofilms”) mediante la técnica de recubrimiento en giro (“spin-coating”). Tanto las medidas realizadas mediante difracción de rayos X en incidencia rasante (GISAXS) como por microscopía de fuerza atómica (AFM) revelan que es posible mantener un apilamiento discótico incluso para espesores en torno a los 10 nm.

6. Biofísica: Conformación de la proteína de membrana Integrina $\alpha 2\beta 3$ III.

El modo en el que la información se transmite desde el mundo exterior hasta el interior de la célula no se conoce con exactitud. Las proteínas de membrana son una parte esencial de este proceso. Actúan como receptores de la señal, como transmisores e incluso a veces como intérpretes. Entre los posibles mecanismos para la transmisión de la información, es posible distinguir dos grupos: aquellos en los que se produce transferencia de materia a través de la membrana celular (proteínas que forman canales iónicos) y aquellos en los que no hay transferencia de materia, sino cambios conformacionales. Comprender los estos cambios conformacionales en la proteína activada y sin activar es crucial para comprender la función de esta proteína. La técnica de dispersión de neutrones a bajo ángulo es muy valiosa, debido a la posibilidad de ‘ensombrecer’ la contribución de parte del sistema. En esta línea de investigación se pretende usar estas técnicas, junto con la simulación molecular, para comprender el mecanismo de transmisión de señal de un tipo particular de proteínas de membrana: las integrinas. El papel de las integrinas en el mecanismo de ligado de fibrinógeno, y por tanto en el proceso de coagulación de la sangre es esencial, pero tras veinte años de genética molecular y los primeros años de técnicas estructurales con resolución atómica, la disposición de las integrinas en la membrana no se conoce.

Estamos empleando la dispersión de neutrones a bajo ángulo y la simulación por ordenador para obtener información sobre la conformación de la proteína en disolución, comparándola con los modelos estructurales de alta resolución.

7. Transferencia Tecnológica: Nuevos materiales poliméricos conductores basados en nanofibras de carbono.

Durante el año 2007 hemos continuado nuestra colaboración con la empresa Grupo ANTOLÍN Ingeniería S.A. y con la empresa REPOL S.A. en la preparación, caracterización y optimización de materiales poliméricos conductores basados en nanofibras de carbono. Los estudios realizados han permitido avanzar en la comprensión de la relación entre la estructura obtenida tras el procesado y la conductividad eléctrica de este tipo de materiales compuestos. Así mismo se han realizados estudios comparativos entre sistemas con nanofibras de carbono y con nanotubos de carbono. Los resultados obtenidos han sido tan esperanzadores como para permitir la formación de un consorcio entre nuestro grupo, la empresa Grupo ANTOLÍN Ingeniería S.A. y otros grupos de investigación que ha solicitado un proyecto PETRI en la convocatoria del 2007.

Grupo de Propiedades Físicas y Nanoestructura de Polímeros

Estudio de los procesos de microdeformación y relación con la nanoestructura en poliésteres orientados.

Se ha investigado la diferente nanoestructura que se genera cuando el politereftalato de etilo (PET) se cristaliza desde el estado vítreo a partir de material amorfo deformado uniaxialmente a temperatura ambiente (25°C) y a una temperatura por encima de la transición vítrea (90°C). Los estudios de difracción de rayos-X a ángulos grandes y pequeños (WAXS y SAXS respectivamente) sugieren que la inclinación del eje *c* cristalográfico y aquélla de las laminillas guardan una relación suplementaria. Se ha observado que cuando el material se cristaliza a partir de PET vítreo deformado a 25°C, cuya orientación molecular es muy acusada, sólo se aprecia una pequeña inclinación del eje molecular *c* y, en cambio, la inclinación de los empaquetamientos cristalinos es muy significativa. Por otro lado, PET vítreo deformado a 90°C y posteriormente cristalizado presenta un ángulo de inclinación del eje *c* muy importante, debido a la menor orientación molecular del material antes de ser sometido al proceso de cristalización. En este caso, no se aprecia inclinación de la superficie de las laminillas cristalinas. La diferente nanoestructura encontrada para el material deformado por debajo y por encima de la temperatura de transición vítrea ha sido correlacionada con sus propiedades micro-mecánicas, encontrándose que en el primer caso la anisotropía mecánica es muy acusada, y en el segundo, el material presenta una respuesta isotrópica a la deformación mecánica local.

Procesos de recristalización en sistemas semirrígidos.

Se han investigado los procesos nanoestructurales asociados a las múltiples endotermas que se observan durante un ciclo de calentamiento de PET cristalizado desde el estado vítreo. El análisis simultáneo de SAXS y WAXS indica que existe un reajuste estructural que comienza inmediatamente después de alcanzar la temperatura de transición vítrea hasta la temperatura de fusión. La naturaleza de los cambios nanoestructurales que se observan depende de la temperatura a la que el material fue cristalizado y de la temperatura de medida. A temperaturas por debajo de la temperatura de cristalización, los cambios estructurales se asocian a la fusión de pequeños cristales. Por encima de la temperatura de cristalización, se observa una importante recristalización, en caso de materiales cristalizados a baja temperatura (100–120°C). Por el contrario, para materiales cristalizados a alta temperatura (160-190°C), un claro proceso de fusión predomina en todo el rango de temperaturas. En este último caso, se ha detectado la presencia de un mecanismo de recristalización simultáneo a la fusión, para temperaturas por encima de 200°C. Los estudios sugieren que la velocidad de calentamiento es determinante para el desarrollo de la nanoestructura.

Desarrollo de modelos teóricos para el estudio de la influencia del confinamiento sobre el proceso de cristalización.

Estudios de análisis térmico dinamo-mecánico (DMTA) llevados a cabo en PET orientado, cristalizado a temperaturas bajas (100–140°C) desde el estado vítreo, muestran un espectro de relajación desplazado a temperaturas más altas respecto al del material sin cristalizar. Además, el espectro del material cristalizado se extiende decenas de grados por encima de la temperatura de cristalización. Este resultado sugiere que durante el curso de la cristalización, el material amorfo sufre un proceso que resulta en una mejora de sus propiedades mecánicas. Dicho proceso podría estar asociado a una “vitrificación” de las regiones amorfas entre cristales, o de las fracciones de material amorfo adyacente a los cristales. Esta

fracción de material amorfo, de rigidez superior al material amorfo “móvil”, se denomina comúnmente fase amorfa rígida. Se ha desarrollado un modelo que utiliza herramientas de la mecánica estadística para describir este posible mecanismo de vitrificación que tendría lugar en las regiones amorfas entre cristales durante el proceso de cristalización. Además, se han empleado parámetros estructurales derivados de SAXS para comprobar la validez de este modelo.

Nanoestructura en materiales confinados mediante difracción y dispersión de rayos X.

Continuando con la investigación de sistemas poliméricos multilaminares, se ha iniciado el estudio de películas finas apiladas donde se alternan dos polímeros semicristalinos: polipropileno (PP) y poliamida 6 (PA6). La combinación de estos dos materiales inmiscibles ofrece la oportunidad de aprovechar la resistencia a la humedad y la facilidad de procesamiento del PP con las excelentes propiedades termomecánicas de la poliamida PA6. Se ha estudiado la disposición de los cristales y la estructura de sistemas PP/PA6 (70/30) formados por 512 láminas. Los resultados obtenidos apuntan a que los cristales de la forma α de PP están orientados con los planos (040) paralelos a la superficies interlaminares. Por otra parte, se ha observado que el mayor confinamiento experimentado por los segmentos moleculares de PA6 genera un efecto de subenfriamiento durante la cristalización de la poliamida que impide la aparición de cristales o que éstos sean muy imperfectos.

La poliamida PA6 también ha sido estudiada en materiales compuestos por fibras de poliamida con nanopartículas de arcilla. Se ha determinado el polimorfismo de estos materiales mediante medidas de TEM Y WAXS en función de la temperatura. La presencia de la arcilla modifica el desarrollo de distintas formas cristalinas a las obtenidas con el material puro.

Se ha investigado asimismo la cinética de cristalización en materiales multilaminares de PET/PC (50/50) con espesores de lámina entre los 10 y los 1000 nm, mediante medidas simultáneas de SAXS y WAXS. Los resultados preliminares obtenidos no muestran diferencias significativas entre la cinética de cristalización de los distintos materiales.

Estudio de la modificación de mezclas de poliolefinas mediante entrecruzamiento químico.

En colaboración con el Dr. Bouhelal, de la Universidad de Sétif, en Argelia, se ha investigado la modificación de la estructura de mezclas de polipropileno isotáctico y polietileno de baja densidad, entrecruzadas de modo reversible por vía química utilizando un método patentado recientemente. Se ha procedido a caracterizar dichas mezclas mediante difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y medida de las propiedades micro y macromecánicas. Los resultados obtenidos indican que la microdureza de las mezclas aumenta con el contenido en polipropileno. Aunque la cristalinidad de las mezclas entrecruzadas es similar a la del material sin modificar, su microdureza es algo mayor. El efecto más notable del proceso de entrecruzamiento es el aumento de la resistencia al impacto en las mezclas modificadas, que en algunos casos va acompañado de la presencia de fractura dúctil.

Por otro lado, se han preparado nanocompuestos de polipropileno entrecruzado mediante el procedimiento anterior con cantidades crecientes de arcilla. Se está investigando la influencia de la presencia de arcilla en la estructura y la correspondiente evolución de las propiedades mecánicas del material.

CAPÍTULO 3: PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Dinámica, compatibilidad molecular y nanoestructura de poliolefinas de nueva generación (MAT2006-0400, MCYT. I. P.: Javier Martínez de Salazar Bascañana. 2006-2009) Estudio de las propiedades fisico-químicas de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas básicos en la física de polímeros y diseño de nuevos materiales con arquitectura controlada

Construcción molecular mediante procesos catalizados por complejos organometálicos. (S-0505/PPQ/000328, Comunidad de Madrid. I.P.: Pascual Royo García (Universidad de Alcalá)/IP del IEM: Javier Martínez de Salazar Bascañana y Víctor Cruz Cañas, 2006-2009) El proyecto tiene como objetivo aunar la experiencia de grupos líderes en la CAM orientando el esfuerzo al desarrollo de nuevos catalizadores organometálicos en diferentes aplicaciones. Nuestro subproyecto se centra en nuevas poliolefinas soportadas en el que se simulan las reacciones de polimerización realizadas por otros grupos y las propiedades físicas de los materiales obtenidos.

Interrelaciones estructura-propiedades de materiales poliméricos y “composites” poliméricos nanoestructurados en volumen y en superficie (MAT2005-01768, Ministerio de Educación y Ciencia, Diciembre 2005-Diciembre 2008, IP: T.A. Ezquerro): 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.

“Structuring Polymers” COST-P12 (EC, 2003-2007, IP: T.A. Ezquerro y M. Gómez): Formación de una red europea para la investigación de la estructuración de polímeros sintéticos.

Carbon nanotubes as potential templates for polymer crystallization in bulk and in thin film materials

(Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) (II-20060160 EC)), Enero 2007-Diciembre2009 (IP: T.A. Ezquerro. Investigación de las posibilidades de nanoplantillas poliméricas con y sin nanotubos de carbono como superficies funcionales activas en la producción de nanoestructuras poliméricas con arquitectura controlada.

Nanoestructuras poliméricas multilaminares: aproximación a un apilamiento de láminas bidimensionales.

(FIS2007-60534., Ministerio de Educación y Ciencia., I.P.:Fernando Ania García., Noviembre 2007- Noviembre 2010). Estudio de sistemas nanoestructurados compuestos por un apilamiento alternante de finas láminas de polímeros inmiscibles desde el punto de vista, tanto de su nanoestructura laminar, como de los cambios que ésta provoca en sus propiedades físicas cuando el espesor de los estratos se hace menor de un valor crítico (confinamiento físico).

Arquitectura electroquímica aplicada a la síntesis de materiales nanoestructurados con propiedades magnéticas singulares (MAT2004-05865, Ministerio de Educación y Ciencia, Diciembre 2004-Diciembre 2007, IP: M. J. Capitán Aranda): 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.

Análisis de la relación Estructura-Actividad mediante descriptores mecano-cuánticos aplicado a la catálisis homogénea para polimerización de olefinas (2005CL0049, C.S.I.C.,I. P.: Víctor Cruz Cañas, 2006-2007). Elucidación de los factores determinantes de la reactividad de catalizadores de centro activo único mediante modelos teóricos provenientes de la Teoría de Funcionales de la Densidad.

Nanoestructura y optimización de propiedades micromecánicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares. (FIS2004-01331, Ministerio de Educación y Ciencia.. I.P: Francisco J. Baltá Calleja, Diciembre 2004-Diciembre 2007). Estudio de la correlación entre la nanoestructura y las propiedades físicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares.

Resolving Kinetics of Early Structure Formation during Shear-Induced Crystallization of Polypropylene.

(ME-1295, UE/European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)).I.P.: Francisco J. Baltá Calleja, 2006-2007).

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

Study of polymer nanostructures under confinement as revealed by WAXS, SAXS and USAXS

(II-20070031 EC, “Deutsches Elektronen Synchrotron” (DESY). I.P.: Francisco J. Baltá Calleja, 2007-2009). Estudios estructurales de sistemas multilaminares mediante radiación sincrotrón de rayos X.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA

Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins

Código o Referencia:

Empresa: DOW Chemicals

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y J.F. Vega

Periodo: 2006-2008

Objetivos: Determinar la influencia de la distribución molecular en las respuestas elásticas de películas orientadas de cara a la optimización de las propiedades mecánicas y de transparencia óptica.

Caracterización de polímeros bimodales a partir de sus componentes

Código o Referencia:

Empresa: Repsol-YPF

Investigador Principal: Prof. J. Martínez de Salazar Bascuñana y J.F. Vega

Periodo: 2007-2008

Objetivos: Estudio de la arquitectura molecular y propiedades físicas de materiales obtenidos mediante nuevos procesos de síntesis.

Incremento de las prestaciones de prototipos mediante la elaboración de materiales termoplásticos cargados con nanofibras de carbono GANF para el ajuste de la resistividad eléctrica.

Código o Referencia: II (EU 3433-APOLYNAIRE)

Empresa: Grupo Antolín-Ingeniería, S.A.

Investigador Principal: T.A. Ezquerro.

Periodo: enero 2007-diciembre 2007.

Objetivos: Investigación de las propiedades dieléctricas y conductoras de una serie de materiales compuestos poliméricos de nanofibras de carbono con diferentes matrices poliméricas: poliamida 12, poliamida 6, poliamida 66, polipropileno y polietileno.

CAPÍTULO 4: COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES

III Reunión Nacional de Usuarios de Radiación Sincrotrón (AUSE), Jaca (Huesca), 9 al 11 de julio de 2007.

- *Applications of synchrotron radiation micro-diffraction to the study of soft condensed matter* (Contribución oral), Mari Cruz García-Gutiérrez.
- *Crystallization of polyamide 12/carbon nanofibers as revealed by X-ray diffraction with synchrotron radiation*. (Poster), A. Linares, J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M.E. Cagiao, D.R. Rueda, C. Merino, T.A. Ezquerra
- *Nanostructured polymer surfaces by Spin Coating: A combined study by Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering (GISAXS) and Atomic Force Microscopy (AFM)*. (Poster), J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra

X Reunión del Grupo Especializado en Polímeros de las RSFQ, Sevilla 18-20 de septiembre 2007.

- Estructura y propiedades físicas de polietilenos obtenidos mediante síntesis dual (Cartel), J. Otegui, J.F. Vega, V. Cruz, O. Prieto, C. Martín y J. Martínez-Salazar
- Influencia de la interfase en la respuesta viscoelástica y las propiedades elongacionales en mezclas de LLDPE/LDPE (Cartel), N. Robledo, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, and J. Nieto

Junta y Asamblea del Grupo Especializado de Polímeros de las RSFQ, Sevilla, 18-20 de septiembre de 2007

-Asistencia como Secretari del GEPo: Javier Martínez-Salazar

MATCOMP07, Valladolid, 19 a 21 de septiembre de 2007.

- *Caracterización mecánica de PET reforzado con nanotubos de carbono* (Comunicación oral), Teresa Gómez del Río, M.C. García Gutiérrez, J.J. Hernández, T.A. Ezquerra, P. Poza, J. Rodríguez

1^{er} Encuentro sobre Polioleofinas de Arquitectura Controlada: de la Síntesis al Producto, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid, 18 de octubre de 2007

- *Estudio de las relajaciones moleculares de polietileno de baja cristalinidad obtenido mediante catalizador metalocénico* Contribución Oral). A. Flores, S. Martín, J. F. Vega, M. T. Expósito, J. Martínez-Salazar
- Efecto tandem en polietilenos bimodales obtenidos mediante síntesis en un único reactor (Cartel), J. Otegui, J.F. Vega, V. Cruz, O. Prieto, C. Martín y J. Martínez-Salazar
- Estructura de fases y propiedades reológicas de mezclas de polietilenos (Cartel), N. Robledo, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, and J. Nieto

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Satellite Meeting: Present Status and Future Perspectives of SAXS, WAXS, and GISAXS

Experiments at HASYLAB, Hamburgo (Alemania), 24 a 26 de Febrero de 2007

- *Study of the Nanolayered Structure of Immisibile Polymers Using USAXS* (Conferencia invitada), Francisco J. Baltá-Calleja, F. Ania
- Asistencia: Tiberio A. Ezquerra Sanz

WP9 IDECAT Workshop: Industry-Academia Partnerships in Catalysis, Sevilla, 29 y 30 de Marzo de 2007

- Asistencia: Javier Martínez de Salazar
- Asistencia: Javier Ramos Díaz

Board of the European Polymer Federation, European Science Foundation, Viena (Austria), 20 a 23 de abril de 2007

- Asistencia como miembro del Comité: Javier Martínez de Salazar

High Performance computing in molecular Simulations, Madrid, Abril 2007

- *Electric Field Effect on Ethylene Polymerization with Zirconocene Catalysts* (Cartel), V.L. Cruz, J. Martinez-Salazar

Panel Review Project (PRP) HASYLAB, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 22 y 23 de abril de 2007

- Asistencia a la Comisión de Evaluación de propuestas, Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Workshop: Scientific Opportunities at X-ray Free Electron Lasers, AUSE, Madrid, 23 y 24 de Abril de 2007

- Asistencia: Francisco J. Baltá Calleja, Araceli Flores Aguilar-Amat, Fernando Ania García, Tiberio A. Ezquerro Sanz, Aurora Nogales Ruiz, MariCruz García Gutiérrez, Daniel R. Rueda.

12th Symposium: Nanostructured Biomaterials Characterization and Properties, Martin Luther University Halle Wittenberg, Wittenberg, Alemania, 10 y 11 de Mayo de 2007

- *Microindentation Methods to Characterize Biomaterials* (Conferencia invitada), Francisco J. Baltá Calleja, Araceli Flores Aguilar-Amat.

European Polymer Federation Congress, EPF 2007, Portoroz (Eslovenia), 2-6 de Julio de 2007.

- *Elongational properties and elimination of extrudate distortions in polyethylene blends* (Comunicación oral), J.F. Vega, J. Otegui, M.T. Expósito, J. Martínez-Salazar
- *The role of the interphase in the viscoelastic response of LLDPE/LDPE blends* (Cartel), N. Robledo, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar, J. Nieto
- *Electric Field Effect on Ethylene Polymerization with Zirconocene Catalysts* (Cartel), V.L. Cruz, J. Martinez-Salazar
- *Hierarchical Monte Carlo/Molecular Dynamics simulation of short chain branched polyethylenes in the molten state* (Cartel), J. Ramos, J. Martínez-Salazar, L. D. Peristeras, D.N. Theodorou.
- *Iron-based post-metallocene catalyst for ethylene polymerization: establishing the nature of the active species* (Cartel), J. Martinez, V.L. Cruz, J. Martínez-Salazar, J. Ramos, S. Gutierrez-Oliva, A. Toro-Labbe.

Excellence Initiative of the DFG in the area of Macromolecular Science, Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Bonn, Alemania, 3 a 8 de Junio de 2007

- Asistencia: Francisco J. Baltá Calleja

Reunión Anual de la Fundación Alexander von Humboldt, Berlín, 14 a 16 de Junio de 2007

- Asistencia: Francisco J. Baltá Calleja

Asamblea General de la 'European Polymer Federation', Portorož, Eslovenia, 7 de Julio de 2007

- Asistencia: Javier Martínez-Salazar

3rd International Indentation Workshop, Universidad de Cambridge, Reino Unido, 15-20 de julio 2007

- *Application of the Microhardness Technique to the Study of Crystallization Processes in Glassy Polymers* (Comunicación oral), Araceli Flores Aguilar-Amat, F.J. Baltá Calleja

SOLEIL (Sincrotrón francés, GIF-sur-YVETTE), Scientific Advisory Committee (SAC), 11 al 13 de julio de 2007

- Asistencia como miembro del SAC: T.A. Ezquerro

6^a Conferencia Iberoamericana en Sistemas, Cibernética e Informática (CISCI 2007), Orlando, Florida, EE.UU., 12 a 15 de julio de 2007

- Asistencia: María José Capitán Aranda

Density Functional Theory 2007, Amsterdam, Holanda, 26 a 31 de agosto de 2007.

- Asistencia: Victor Cruz Cañas

Nanoconsortium Annual Meeting, Dublín, Irlanda, 9 a 12 de septiembre de 2007

- Asistencia: Victor Cruz Cañas

Carbon Nano Tube (CNT)- Polymer Composites, Cambridge, Reino Unido, 10 a 12 de septiembre de 2007

- *Deformation behaviour during cold drawing of nanocomposites based on single wall carbon nanotubes and poly(ether ester)*. (Contribución oral), Mari Cruz García-Gutiérrez, J.J. Hernández, A. Nogales, D.R. Rueda, A. Sanz, Z. Roslaniec, G. Broza, T.A. Ezquerra.
- *Influence of preparation procedure on the conductivity and transparency of SWCNT-polymer nanocomposites*. (Póster), J.J. Hernández, Mari Cruz García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, M. Kwiatkowska, Z. Roslaniec, T.A. Ezquerra.
- *Influence of preparation procedure on the conductivity and transparency of SWCNT-polymer composites*. (Poster) J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, M. Kwiatkowska, Z. Roslaniec T.A. Ezquerra
- *Broadband Electrical Conductivity of Polymer Nanocomposites with Carbon Nanoadditives*. (Poster). T.A. Ezquerra, I. Matín Gullón, A. Linares, J.C. Canalda, M.E. Cagiao, R. Andrews.

MTS Nano User's Meeting: "Exploring Nanomechanics", Madrid, 6 y 7 de Septiembre de 2007

Asistencia: Fernando Ania García y Araceli Flores Aguilar-Amat

XVI Encuentro Anual de la Asociación Alexander von Humboldt de España. "Dimensión educativa, científica y social de la inmigración con especial atención a África", Palma de Mallorca, 20 a 23 de septiembre de 2007

- Asistencia: F.J. Baltá Calleja

COST P12 Conference 2007. Discussion meeting on polymer crystallisation. Waldau, Germany 3–6 October 2007

- Effect of branching on early nucleation stages of polyethylene: a stochastic study (Cartel). J.Ramos, J. Martínez-Salazar
- The beta-relaxation as a probe to follow real-time polymer crystallization in model aliphatic polyesters (poster). M. Soccio, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari, J.J. Hernández, T.A. Ezquerra
- A new approach to model re-crystallization in PET (Poster), M. Pieruccini, A. Flores, G. Di Marco, U. Nöchel, N. Stribeck, F. J. Baltá Calleja

234th National Meeting American Chemical Society, Boston, MA (USA). 19-23 August 2007

- Using the beta-relaxation as a probe to follow real-time polymer crystallization in model aliphatic polyesters. (Conferencia Invitada) T.A. Ezquerra

II Workshop on Applications of Synchrotron Light to Non-Crystalline Diffraction in Materials and Life Sciences, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 15-17 Octubre 2007.

- Influence of Shear on the Templated Crystallization of Poly(butylenes terephthalate)/Single Wall Carbon Nanotube Nanocomposites. (Póster), Mari Cruz García-Gutiérrez, J.J. Hernández, A. Nogales, P. Panine, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra.
- Recrystallization studies in cold crystallized PET (Comunicación oral), A. Flores, M. Pieruccini, F. Ania, F. J. Baltá Calleja .
- A new approach to model re-crystallization in PET (Poster), M. Pieruccini, A. Flores, G. Di Marco, U. Nöchel, N. Stribeck, F. J. Baltá Calleja .

The China-Netherlands Symposium on Electrón Microscopy, Pekín, China, 14-17 de noviembre de 2007.

- Asistencia: Javier Martínez-Salazar y Juan Francisco Vega Borrego

IV Congreso argentino-chileno de polímeros, Archipol 2007, Viña del Mar (Chile), 3-5 de diciembre de 2007.

- *A molecular route to improve processability in metallocene polyethylenes* (Oral). J. Martínez-Salazar, J. F. Vega and M.T. Expósito

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

- ❖ **Said Bouhelal**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Argelia, 14 de abril a 10 de junio de 2007; 15 de julio a 1 de agosto de 2007.
- ❖ **Dra. M. Soledad Gutiérrez Oliva**, Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile 1 al 15 de Octubre de 2007.
- ❖ **Michelina Soccio**, Universidad de Bolonia, Italia, 6 de mayo a 31 de julio de 2007.
- ❖ **Alejandro Toro-Labbé**, Laboratorio de Química Teórica Computacional, Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, 1 al 15 de Octubre de 2007
- ❖ **Sven Henning**, Universidad de Halle (Alemania), 2-16 de octubre de 2007.
- ❖ **Dr. Marco Pieruccini**, Universidad de Mesina, Italia. Sabático del MEC (desde 1/10/07)
- ❖ **Abdelhak Hellati**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Argelia, 13 de Noviembre a 8 de Diciembre de 2007.

4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

Dr. Saïd Bouhelal (LMPMP Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif, Argelia): **Control of the Microstructure of iPP and iPP/nano-clays by Reversible Crosslinking Reaction (RXR) in Reactive Extrusion (REX)** (5 de Junio de 2007)

Prof. Alejandro Toro-Labbé. Laboratorio de Química Computacional (QTC), Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile: "*Flujo Electrónico en Reacciones Químicas. Concepto y Aplicaciones*" (11 de Octubre de 2007.)

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES (De una semana o más)

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Javier Martínez de Salazar

- European Polymer Federation, Viena, Austria, 20 a 22 de Abril de 2007 Prof. Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
- Laboratorio de Química Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile, 20 noviembre-7 de diciembre 2007

Tiberio Ezquerria

- Instituto Laue-Langevin, Grenoble, Francia, 2 a 4 de mayo de 2007
- Universidad Técnica de Szczecin, Szczecin, Polonia, 28 de mayo a 1 de junio de 2007
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 7 a 12 de septiembre de 2007
- Instituto de Microsistemas de la Universidad de Freiburg, Alemania, 1 a 3 de octubre de 2007
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francia, 28 de Noviembre a 3 de Diciembre 2007

Daniel Rueda

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 7 a 11 de septiembre de 2007

Fernando Ania García

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 17 a 22 de junio de 2007
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 27 a 31 de octubre de 2007

M^a José Capitán Aranda

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 22 a 26 de febrero de 2007; 14 y 15 de junio de 2007; 23 de septiembre a 1 octubre de 2007.
- Sincrotrón sueco Lund, Suecia, 17 a 25 de junio de 2007
- Morehouse School of Medicine, Atlanta, EE.UU., 17 a 22 de julio de 2007
- Paul Scherrer Institut (PSI), Villigen, Suiza, 30 octubre a 6 de noviembre de 2007

Araceli Flores Aguilar-Amat

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 17 a 22 de junio de 2007
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 27 a 31 de octubre de 2007

Aurora Nogales

- Institut Laue-Langevin, Grenoble, Francia, 2 a 4 de mayo de 2007
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francia, 28 de-Noviembre a 3 de Diciembre2007

MariCruz García Gutiérrez

- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, Francia, 28 de-Noviembre a 3 de Diciembre2007

Francisco J. Baltá Calleja.

- Universidad de Cleveland, EE.UU., 31 de Marzo a 8 de Abril de 2007.
- Universidad de Stony Brook, New York, EE.UU., 8 a 16 de Abril de 2007.
- Universidad de Hamburgo, Hamburgo, Alemania, 2 a 9 de Mayo de 2007; 20 de Mayo a 2 de Junio de 2007; 10 a 17 de Julio de 2007.
- Martin-Luther-Universität, Halle, Alemania, 12 a 14 de Mayo de 2007; 9 a 13 de Junio de 2007;
- Universidad de Kassel, Kassel, Alemania, 15 a 20 de Mayo de 2007.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 16 a 22 de Junio de 2007; 26 de octubre a 2 de Noviembre de 2007.
- Instituto Max Planck, Potsdam, Alemania, 17 a 23 de Julio de 2007.
- Universidad de Kaiserslautern, Alemania, 24 a 27 de Julio de 2007.
- Instituto de Procesos Físico-Químicos (CNR), Messina, Italia, 6 al 13 de Septiembre de 2007.
- Universidad de Sétif y Universidad de Bejaia, Argelia, 14 a 21 de Octubre de 2007.

Jaime Hernández Rueda

- Universidad Técnica de Szczecin, Szczecin, Polonia, 28 de Mayo a 2 de Junio de 2007
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 7 a 12 de Septiembre de 2007
- Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK). Universidad de Freiburg. (Freiburg, Alemania). Desde el 3 de Septiembre hasta el 29 de Noviembre de 2007.

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

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

Javier Martínez-Salazar Bascuñana

- “Aproximación jerárquica a los fenómenos de viscoelasticidad en polímero” Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, 21 de noviembre de 2007
-

Tiberio A. Ezquerro Sanz

- *Breve Introducción a la Física de los Materiales Poliméricos* . Curso de la Fundación Complutense: Nuevos usos para viejos materiales y nuevos materiales para viejos usos. Universidad Complutense de Madrid 16 a 19 de Abril 2007.
- *Nanostructure of Polyester and Ether-crown polymer thin films*. Institut für Mikrosystemtechnik, University of Freiburg, Alemania, 2 de October 2007.

M^a José Capitán Aranda

- *Uso de la radiación de sincrotrón en el análisis de superficies*” en el Curso ‘Crystallographic School’, Jaca (Huesca), 21 de octubre de 2007

Araceli Flores Aguilar-Amat

- *Creando sistemas poliméricos nanolaminares: una ruta hacia la bidimensionalidad*, Instituto de Estructura de la Materia (IV Curso de iniciación a la investigación en estructura de la materia), 29 Marzo de 2007.

Victor Cruz Cañas.

- Simulación de procesos físico-químicos mediante hipercomputación. IV 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, 28-30 de marzo de 2007

Juan Francisco Vega Borrego.

- Reología y topología molecular de polietilenos obtenidos mediante catalizadores de centro activo único. Instituto de Estructura de la Materia (CSIC)/URJC, Madrid 7 de febrero de 2007
- Las macromoléculas en movimiento: de la reptación al flujo. IV 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, 28-30 de marzo de 2007**

Francisco J. Baltá Calleja

- *Nanostructure Characterization in Multilayered Polymer Systems Using X-ray Scattering Methods and Microindentation Techniques*, Universidad de Cleveland (EE.UU.), 3 de Abril de 2007.
- *Micromechanical Properties of Polymer Materials Relating to Nanostructure Derived from SAXS*, Universidad de Cleveland (EE.UU.), 5 de Abril de 2007
- *Study of the Nanostructure of Immisible Polymers Using USAXS: Effects of Confinement*, Universidad Stony Brook, New York (EE.UU.), 12 de Abril de 2007
- *Nanostructure Development During Crystallization of Polymers as Revealed by Microhardness: Influence of Aging and Annealing*, Universidad de Kassel (Alemania), 16 de Mayo de 2007
- *Micromechanical Properties and Nanostructure of Multilayered Polymer Systems*, Universidad de Kassel (Alemania), 18 de Mayo de 2007

- *Nanostructure characterization in multilayer polymer system using SAXS methods*, Instituto Max Planck, Potsdam (Alemania), 18 de Julio de 2007
- *Micromechanical Properties of Polymeric Materials Relating to Nanostructural Parameters*, Universidad de Kaiserslautern (Alemania), 25 de Julio de 2007
- *Characterization of the nanostructure in multilayered polymer systems using synchrotron radiation techniques*, Instituto de Procesos Físico-Químicos (CNR) Messina (Italia), 12 de Septiembre de 2007
- *Micromechanical properties of polymers and composite materials relating to nanostructure parameters*, Laboratoire des Matériaux Polymères Multiphasiques (LMPMP), Département de Génie des Procédés, Faculté des Sciences d'Ingénieur, Sétif (Argelia), 16 de Octubre de 2007.
- *Micromechanical properties of polymers and composite materials relating to nanostructure parameters*, Département de Génie des Procédés, Faculté des Sciences et des Sciences de l'Ingénieur, Université A. Mira- Béjaia (Argelia), 20 de Octubre de 2007.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

J. Martínez de Salazar Bascuñana , Javier Ramos Diaz y Víctor Cruz Cañas

- *Workshop: "High Performance Computing in Molecular Simulation"*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 19 Abril 2007

J. Martínez-Salazar Bascuñana, S. Prashar, J. Ramos Díaz, J.F. Vega Borrego.

- Primer Encuentro sobre Poliolefinas de Arquitectura Controlada (EPAC I), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 18 de Octubre 2007.

Jaime J. Hernández Rueda

- *Aplicación de la microscopía de fuerza atómica al estudio de materiales poliméricos*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados 2007, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 14 Junio 2007

Mari Cruz García-Gutiérrez, Marian Gómez, Aurora Nogales y Tiberio Ezquerro

- *II Workshop on Applications of Synchrotron Light to Non-Crystalline Diffraction in Materials and Life Sciences*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 15-17 Octubre 2007

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Miembro del Comité *Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, desde Marzo de 1996.
- Miembro del Consejo Rector del CSIC, Ministerio de Educación y Ciencia, desde Marzo de 1999 hasta la fecha. Javier Martínez de Salazar Bascuñana.
- Miembro del Comité Científico del EPF 2007
- Miembro del comité editorial de la revista e-polymer

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Miembro del *Scientific Advisory Committee (SAC)* del Sincrotrón SOLEIL, Francia, Diciembre de 2005-diciembre de 2007.
- Miembro del *Review Panel Committee* del HASYLAB, DESY, Hamburgo, Alemania, Octubre de 2006-octubre de 2008.
- Miembro del "International Dielectric Society Board" de la "International Dielectric Society" (<http://permittivity.org>)

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Miembro de la Junta Directiva de AUSE (Asociación de usuarios de sincrotrón de España), desde Julio de 2007.

Francisco J. Baltá Calleja.

- Consejero de la *Sociedad de Estudios Internacionales* (SEI), desde Abril de 2006.

Sonia Martínez Hedo

- 2º Premio del GEP (Grupo Especializado en Polímeros) a las mejores tesis doctorales en polímeros 2005-2006.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

Título: *Study of the relationships between solid-state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins.*

Colaboración: **IEM/Dow Chemicals.**

Lugar: Dow Chemicals, Tarragona.

Fecha: 9 de marzo de 2007.

Ponente: Víctor Cruz Cañas

Título: *Evaluación de la Reactividad de Catalizadores Bis(imino)Piridina de Hierro (II)*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de marzo de 2007.

Ponente: Javier Ramos Díaz.

Título: *Mecanismo de ramificación de cadena larga durante el proceso de polimerización en catalizadores de centro activo único: Estudios computacionales.*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de marzo de 2007.

Ponente: Víctor Cruz Cañas

Título: *Interacción de hidrógeno molecular con catalizadores Bis(imino)Piridina de Hierro*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Javier Martínez-Salazar.

Título: *Microestructura y propiedades de nuevos materiales obtenidos mediante síntesis dual.*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

Título: *Papel de la estructura de los catalizadores usados para la síntesis de polietilenos bimodales en la formación de ramificación de cadena larga.*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Jon Otegui de la Fuente.

Título: *Efecto del hidrógeno en la arquitectura molecular y las propiedades de polietilenos bimodales obtenidos mediante síntesis dual.*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Informes de transferencia tecnológica

A. Linares, J.C. Canalda, E. Cagliao, J.J. Hernández, M.C. García Gutiérrez, T.A. Ezquerra
Composites basados en poliamida 12/nanofibras de carbono preparados mediante polimerización “in situ”. Grupo ANTOLIN Ingeniería S.A. (Diciembre, 2007).

Jon Otegui de la Fuente, Juan Francisco Vega Borrego, Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Caracterización de polímeros bimodales a partir de sus componentes
Repsol YPF (Julio, 2007).

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrego, Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the relationships between solid-state morphology and melt state properties of blends of linear low-density polyethylene and other polyolefins. On the effect of the interphase.
Dow Chemicals (Marzo, 2007).

5.5 OTRAS ACTIVIDADES

CAPÍTULO 6: PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS ISI

F. J. Baltá Calleja, G. Di Marco, A. Flores, M. Pieruccini
Confinement-induced vitrification in polyethylene terephthalate
Phys. Rev. B, **75**, 224201 (2007)

S. Bouhelal, M. E. Cagiao, D. Benachour, F. J. Baltá Calleja.
Structure Modification of Isotactic Polypropylene through Chemical Crosslinking: Toughening Mechanism
J. Appl. Polym. Sci., **103**, 2968-2976 (2007)

M. E. Cagiao, A. O. Podnyakov, M. Krumova, V. V. Kudryavtsev, F. J. Baltá Calleja.
Nanostructure Evolution during Thermal Treatment of Polyimide-Fullerene Composites as Revealed by WAXS and SAXS
Composites Science and Technology, **67**, 2175-2182 (2007)

M. E. Cagiao, A. O. Pozdnyakov, M. Krumova, V. V. Kudryavtsev, F. J. Baltá Calleja
Thermal Imidization of Polyamic Acid-Fullerene Composites: "In situ" X-Ray Diffraction Study
Composite Interfaces, **14**, 199-213 (2007)

V. Compañ, F.J. Fernández-Carretero, E. Riande, A. Linares and J.L. Acosta.
Electrochemical Properties of Ion-Exchange Membranes Based on Sulfonated EPDM-Polypropylene Blends.
J. Electrochem. Soc. 154 (2): B159-B164 (2007).

V.L. Cruz, S. Martínez, J. Martínez-Salazar, D. Polo-Cerón, S. Gómez-Ruiz, M. Fajardo and S. Prashar
3D-QSAR study of ansa-metallocene catalytic behavior in ethylene polymerization
Polymer **48**, 4663-4674 (2007)

V.L. Cruz, S. Martínez, J. Martínez-Salazar y J. Sancho
Proposed Polymerization Termination Mechanism for 3-R-Indenyl ansa-Zirconocenes (R = n-Alkyl) Based on DFT Calculations and Experimental Observations
Macromolecules **40**, 7413-7415 (2007)

V.L. Cruz, J. Martínez, J. Martínez-Salazar, J. Ramos, M. L. Reyes, A. Toro-Labbe y S. Gutierrez-Oliva
QSAR model for ethylene polymerisation catalysed by supported bis(imino)pyridine iron complexes.
Polymer **48** (26) 7672-7678 (2007)

M.T. Expósito, J.F. Vega y J. Martínez-Salazar
Microstructure and mechanical properties of ethylene-co-styrene polymers obtained from [norbornane-7,7-bis(indenyl)]titanium dichloride catalyst system
Journal of Applied Polymer Science **106**, 1421-1430 (2007)

M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, C. Domingo, J.V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte and T.A. Ezquerria
X-ray microdiffraction and micro-Raman study on an injection moulding SWCNT-polymer nanocomposite
Composite Science and Technology, **67**, 798-805 (2007)

G. Kim, G.H. Michler, F. Ania, F.J. Baltá Calleja
Temperature dependence of polymorphism in electrospun nanofibres of PA6 and PA6/clay nanocomposite
Polymer, **48** (16), 4814-4823 (2007)

- J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, A. Sanz, I. Sics, B.S. Hsiao, Z. Roslaniec, G. Broza and T.A. Ezquerra
Deformation behaviour during cold drawing of nanocomposites based on single wall carbon nanotubes and poly(ether ester) copolymers
 Polymer, **48**, 3286-3293 (2007)
- A. Linares, A. Nogales, D.R.Rueda, T.A.Ezquerra
Molecular dynamics in PVDF/PVA blends as revealed by dielectric loss spectroscopy.
 Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics 45(13), 653 (2007).
- S. Martínez, K. Morokuma y D. G. Musaev
Mechanistic Aspects of Dinitrogen Hydrogenation Catalyzed by the Geometry-Constrained Zirconium and Titanium Complexes: Computational Studies
 Organometallics **26**, 5978–5986 (2007)
- C. Navio, J. Alvarez,, M.J. Capitan, D. Ecija, J.M. Gallego, F. Yndurain, R. Miranda
Electronic structure of ultrathin gamma '-Fe4N (100) films epitaxially grown on Cu(100)
 Physical Review B, 75(12), 125422 (2007).
- C. Navio,, M.J. Capitan, J. Alvarez, F. Yndurain, R. Miranda
Intrinsic surface band bending in Cu3N(100) ultrathin films
 Physical Review B, 76(8), 085105 (2007).
- A. Nogales, D.R. Rueda, A. Sanz, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerra, M.G. Zolotukhin, M. Del Carmen, H.M. Colquhoun
Characterization of the layered structure in main chain dibenzo-18-crown-6 ether polymers by simultaneous WAXS/MAXS-SAXS/DSC measurements
 Macromolecules, **40**(9), 3355-3360 (2007)
- J. Otegui, J. F. Vega, S. Martín, V. Cruz, A. Flores, C. Domingo, J. Martínez-Salazar
*The unit cell expansion of branched polyethylene as detected by Raman Spectroscopy: an experimental and simulation approach **Publicación conjunta con C. Domingo Maroto***
 J. Mater. Sci. Lett., **42**, 1046-1049 (2007)
- W. Pisula, M. Kastler, B. El Hamaoui, M.C. García-Gutiérrez, R.J. Davies, C. Riekell, K. Müllen
Dendritic morphology in homeotropically aligned discotic films
 ChemPhysChem, **8**(7), 1025-1028 (2007)
- J. Ramos, L. D. Peristeras y D.N. Theodorou
Monte Carlo Simulation of Short Chain Branched Polyolefins in the Molten State
 Macromolecules, **40** (26) 9640-9650 (2007)
- M. Soccio, A. Nogales, Nadia Lotti, Andrea Munari, Tiberio A. Ezquerra
Evidence of early stage precursors of polymer crystals by dielectric spectroscopy
 Physical Review Letters, **98**, art. no. 037801 (2007)
- M. Soccio, L. Finelli, N. Lotti, A Munari, T.A.Ezquerra.
Novel heheroatoms containing polyesters based on 2,6-naphthalendicarboxylic acid: A comparative study with poly(butylene naphthalate)
 Journal of Polymer Science, Part B-Polymer Physics 45(13):1694-1703 (2007)
- M. Soccio, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari, T.A. Ezquerra,
The beta-relaxation as a probe to follow real-time polymer crystallization in model aliphatic polyesters.
 Polymer 48 (16): 4742-4750 (2007).
- A. Sanz, A.Nogales, N. Lotti, A.Munari, T. A. Ezquerra,
Complex nature of the beta relaxation and fragility in aromatic polyesters .
 Journal of Non Crystalline Solids 353 (41-43): 3989-3995 (2007).

M. Pieruccini, T.A. Ezquerra, and M. Lanza
A phenomenological model for the confined dynamics in semicrystalline polymers: the multiple alpha relaxation in cold-crystallized PET.
Journal of Chemical Physics 127 (10): Art. No. 104903 (2007).

M.J. Cánovas, I. Sobrados, J. Sanz, T.A. Ezquerra, A. Linares.
NMR and Electrical Conductivity Studies of Poly(2,6-dimethyl-1,4-phenyleneoxide) ionomers.
Solid State Ionics. 178 (15-18): 1049-1057 (2007).

D.R. Rueda, A. Nogales, J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerra, S.V. Roth, M.G. Zolotukhin, R. Serna
Stacking of Main Chain-Crown Ether Polymers in Thin Films
Langmuir 23(25), 12677 - 12681 (2007)

T. Uchiyama, M. Suyama, M. M. Alam, T. Asano, S. Henning, A. Flores, F. J. Baltá Calleja, M. F. Mina
Layer structure formation in oriented poly(ethylene terephthalate) relating to micromechanical properties
Polymer, **48**, 542-555 (2007)

6.2 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS NO ISI

M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, J. Hernández, D. R. Rueda, T. A. Ezquerra.
X-ray scattering applied to the analysis of carbon nanotubes, polymers and nanocomposites.
Optica Pura y Aplicada, 40 (2) 195-205 (2007).

6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS

Aurora Nogales Ruiz
El Plástico en el Siglo XXI
En “Jornadas de Polímeros de Interés Tecnológico: Un Curso de Diapositivas en Power Point”.
Eds. M.A. Rodríguez-Pérez, M.L. Rodríguez-Méndez, V. Rives.
Universidad de Valladolid (2007).
ISBN: 978-84-690-3739-3.

Mari Cruz García Gutiérrez.
Química-Física de Polímeros.
En “Jornadas de Polímeros de Interés Tecnológico: Un Curso de Diapositivas en Power Point”.
Eds. M.A. Rodríguez-Pérez, M.L. Rodríguez-Méndez, V. Rives.
Universidad de Valladolid (2007).
ISBN: 978-84-690-3739-3.

A. Nogales, A. Sanz, I. Sics, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerra
Order and segmental mobility in crystallizing polymers
En “Progress in Understanding of Polymer Crystallization”
Lecture Notes in Physics, 714, 435-456 (2007). Eds. G.Reiter, G. Strobl.
ISBN-13 978-3-540-47305-3

6.4 TESIS DOCTORALES

6.5 TESINAS DE LICENCIATURA, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER