PRESENTACIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia, creado en 1976, centra su actividad en la investigación teórica y experimental de diversos aspectos básicos de la Física, la Química y la Ciencia de Materiales. El Instituto forma parte del Centro de Física M. A. Catalán, junto con el Instituto de Óptica Daza de Valdes y el Instituto de Matemáticas y Física Fundamental.

El Instituto de Estructura de la Materia está formado por seis departamentos: Química y Física Teóricas, Física Nuclear y Física Estadística, Física Molecular, Física Macromolecular, Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos, y Astrofísica Molecular. Actualmente el Instituto cuenta con 38 investigadores de plantilla, 15 doctores contratados y 32 becarios predoctorales. El personal de apoyo se compone de 35 miembros, distribuidos entre los seis departamentos citados, la Unidad de Gestión Económico-Administrativa, y los servicios de Biblioteca, Almacen, Conserjeria y Talleres.

La financiación del Instituto proviene de las subvenciones recibidas en forma de proyectos de investigación del Ministerio de Educación y Ciencia, la Comunidad de Madrid, y la Unión Europea, así como de diversos contratos con entidades públicas y privadas.

La labor científica del Instituto durante el año 2004 se ha reflejado en 162 publicaciones en revistas científicas, 13 artículos en libros y monografías, 5 tesis doctorales, y 2 tesis de licenciatura.

En este año ha tenido lugar la promoción a la escala de Investigadores Científicos del CSIC, de los doctores Olof Tengblad y José González. Por último, cabe destacar la incorporación, como Científicos Titulares, al Departamento de Química y Física Teóricas, de los doctores Guillermo Mena y Fernando Barbero, procedentes del IMAFF.

Capítulo 1

ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

1.1 DIRECCIÓN

Director: Dr. José Vicente García Ramos.

Vicedirector: Dr. Juan Ortigoso Martínez.

Gerente: Dña. Pilar Criado Escribano.

1.4 DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

1.4.1 DPTO. DE FÍSICA y QUÍMICA TEÓRICAS

Jefe del departamento: José González Carmona Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Guillermo Antonio Mena Marugán
Jesús Fernando Barbero González
Científico Titular
Científico Titular
Cuis Javier Garay Elizondo
Eduardo J. Sánchez Villaseñor
Pablo Galán Sánchez
Doctor Vinculado
Autorizado Permanencia

1.4.2 DPTO. DE FISICA NUCLEAR y FISICA ESTADISTICA

Jefe del departamento: Dra. Ma José García Borge Investigadora Científica

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Prof. Javier Bermejo Barrera
Profesor de Investigación
Prof. Elvira Moya Valgañón (E. Moya de Guerra)
Profesora de Investigación
Dr. Jorge Dukelsky Berkovich
Dr. Olof Erik Tengblad
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dr. Carlos Esebbach Benchimol

Profesor de Investigación
Investigador Científico
Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Doctor Vinculado

Dr. Luis Mario Fraile Prieto Doctor Vinculado
Dr. Carlos Cabrillo García Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Dr. Ricardo Fernández Perea Investigador Contratado (Ramón y Cajal)

Dr. Ricardo Fernández Perea Investigador Contratado (Ras Dra. Manuela Turrion Nieves Tit. Sup. Contratado Dr. Néstor Veglio Ruiz Tit. Sup. Contratado. D. Ibón Bustinduy Uriarte Becario Predoctoral

Dña. Raquel Álvarez Rodríguez Becaria Predoctoral D. Rafik Boutami Becario Predoctoral D. Diego Escrig Forano Becario Predoctoral D. César Fernández Ramírez Becario Predoctoral D. Miguel Madurga Flores Becario Predoctoral Dña. Aranzazu Maira Vidal Becaria Predoctoral Dña. Yolanda Prezado Alonso Becaria Predoctoral D. Adolfo Saban Iglesias Becario Predoctoral Dña. Beatriz Errea Subero Becaria Predoctoral

D. Oscar Moreno Díaz Becario Introducción a la Investigación

Personal de apoyo:

Dña. Isabel Recio RincónTit. Superior ContratadaDña. Purificación Corchete CorcheteAyudante Laboratorio

1.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Jefe del departamento: Dr. Julio Santos Gómez Científico Titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza Profesor de Investigación Prof. Salvador Montero Martín Profesor de Investigación

Prof. José Manuel Orza Segade Profesor de Investigación (vinculado "ad honorem")

Dra. Concepción Domingo Maroto
Dr. Rafael Escribano Torres
Investigador Científico
Dr. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga
Investigador Científico
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Investigadora Científico
Dr. José Luis Doménech Martínez
Dr. José María Fernández Sánchez
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Científico Titular
Científico Titular
Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dra. Belén Maté Naya Investigadora Contratada (Ramón y Cajal)
Dr. Ángel Ramos Gallardo Investigador Contratado (Juan de la Cierva)

Dr. Marco Castillo García

Dña Delia Fernández Torre

Dña Laura Gómez Martín

D. Ismael Keneth Ortega Colomer

Dña Isabel Méndez Sánchez

Dña. Beatriz Martín Llorente

Dr. Gustavo Ávila Blanco

Becario Predoctoral

Becaria Predoctoral

Becaria Predoctoral

Doctorando

Personal de apoyo:

Dr. Guzmán Tejeda Gala Titulado Superior

D. José Manuel Castillo de Pedro Ayudante Diplomado de Investigación

D. Miguel Ángel Moreno Alba Ayudante de Învestigación

1.4.4 DPTO. DE ASTROFISICA MOLECULAR E INFRARROJA

Jefe del departamento: José Cernicharo Quintanilla Profesor de Investigación

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Jesús Martín-Pintado Martín
Antonio Macias Martínez
Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Científico Titular
Maria Luisa Senent Diez
Investigador A3

Francisco Najarro de la Parra Investigador Contratado (Ramón y Cajal) Juan Ramón Pardo-Carrión Investigador Contratado (Ramón y Cajal) Almudena Alonso Herrero Investigador Contratado (Ramón y Cajal)

María Jesús Sempere Doctor. Contrato I3P
Eduardo González Alfonso Doctor Vinculado
Arturo Rodríguez Franco Doctor Vinculado
Rosa Domínguez Gómez Doctor Vinculado
Javier Rodríguez Goicoechea Becario Postdoctoral I3P
Javier Corrales García Titulado Superior Contratado
Irma Rodríguez Pérez Titulado Superior Contratado

Fernando Martín Jiménez
Titulado Superior Contratado
Manuel Sánchez Renedo
Titulado Medio de Investigación
Izaskun Jiménez Serra
Becario Predoctoral FPI
José Pablo Fonfria Expósito
Becario Predoctoral I3P
Miguel Requena Torres
Becario Predoctoral FPI

Macarena García Marín

Marcelino Agundez Chico

Helena Masso González

Becario Predoctoral FPI

Becario Predoctoral FPU

Becario Predoctoral FPI

Becario Predoctoral FPI

Becario Predoctoral FPI

Becario Predoctoral FPI

Autorizado Permanencia

Personal de apoyo:

Fernández Clavero Alicia Ayudante de Investigación

1.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Jefe del departamento: Magna Santos Greve Científico Titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Dra. D^a. Juana Bellanato Fontecha
Prof. Inv. (vinculada "ad honorem")
Dr. D. Pedro Carmona Hernández
Investigador Científico
Dr. D. José Vicente García Ramos
Dr. D. Luís Díaz Sol
Científico Titular
Dr. D. José Antonio Sánchez Gil
Científico Titular

Dr. D. José Antonio Sánchez Gil Científico Titular
Dr. D. Santiago Sánchez Cortés Científico Titular
Dra Da Sonia Murcia Mascarós Investigadora Con

Dra. D^a Sonia Murcia Mascarós Investigadora Contratada I3P
Dra. M^a Aranzazu Rodríguez Casado Investigadora Contratada I3P
Dra. D^a Margarita Álvarez Ros Doctora Vinculada

Dra. Marina Molina Santos
Doctora Vinculada
Dr. D. Juan Alberto Torresano Escobosa
Dña. Mª Vega Cañamares Arribas
D. Bousselham Samoudi
D. Vincenzo Giannini

Personal de apoyo:

D^a. María Luisa López Gil Ayudante de Investigación

Ma. del Carmen García Collado
Auxiliar Administrativo (hasta 14/07/04)
Raimundo Villar Martínez
Auxiliar Administrativo (desde 15/07/04)

1.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del departamento: Dr. D. Tiberio Ezquerra Sanz Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos: Escala o Categoría:

Dr. D. Francisco José Baltá Calleja
Profesor de Investigación
Dr. D. Javier Martínez de Salazar Bascuñana
Profesor de Investigación
Dr. D. Daniel Reyes Rueda Bravo
Investigador Científico
Dr. D. Fernando Ania García
Científico Titular
Dra. Dña. Ma Esperanza Cagiao Escohotado
Científica Titular
Científica Titular

Dra. Dña. Ma Esperanza Cagiao Escohotado Científica Titular
Dra. Dña. María José Capitán Aranda Científica Titular
Dra. Dña. Araceli Flores Aguilar-Amat Científica Titular
Dra. Dña. Ma Cruz García Gutiérrez Investigadora Con

Dra. Dña. Mª Cruz García Gutiérrez Investigadora Contratada
Dr. D. Antonio Muñoz-Escalona Lafuente Titulado Superior Contratado

Dra. Dña. Aurora Nogales Ruiz Investigadora Contratada (Ramón y Cajal)

Dr. D. Juan Francisco Vega Borrego Investigador Contratado
Prof. Manfred Pilkuhn Sabático (MEC)
Dr. Rudiger K. Bayer Sabático (MEC)
Dr. D. Francisco Javier Ramos Diaz Becario Postdoctoral

Dr. D. Francisco Javier Ramos Diaz

Dña. Ma Teresa Expósito Espinosa

Dña. Sandra Martín Rauseo

Dña. Sonia Martínez Hedo

Dña. Inés Puente Orench

D. Alejandro Sanz Parras

Becario Postdoctoral

Becaria Predoctoral

Becaria Predoctoral

Becaria Predoctoral

Becaria Predoctoral

Personal de apoyo:

Dr. D. José Carlos Canalda Cámara Dña. Ana M. Montero Cuéllar Titulado Superior Especializado Ayudante de Investigación

ADMINISTRACIÓN

Dña. Pilar Criado Escribano Dña. Ana María García Arribas

Dña. Concepción Nieto Serrano Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática

Dña. Avelina Rey Borrajo Dña. Isabel Lombán Botello Administrativo Auxiliar Administrativo

Ayudante de Investigación

Ayudante de Investigación

BIBLIOTECA

Pilar Aranguena Pernas Margarita Martínez Álvarez Cristobal Pozo Molina Técnico Especialista de Grado Medio

Administrativo Administrativo

TALLER MECÁNICO

Benito Morales Guillén José María Prieto Zardón T. Especialista de Grado Medio de oo. Públicos de Invest.

Técnico Subalterno 2ª

TALLER ÓPTICO

José Lasvignes Pacheco

Ténico de Actividades Técnicas de Mantenimiento y Ofic.

MANTENIMIENTO

Gemma Heras Juaristi Belén Palero Fernández José María Sanz Pastor Técnico Medio área Técnica, Mantenimiento y Ofic. G.2

Ayudante de Investigación

Oficial de Mantenimiento y Oficios

PROYECTOS y DELINEACIÓN

Andrés de Frutos Gómez José Granados Valenzuela Titulado Técnico Especializado Ayudante de Investigación

INFORMÁTICA

Carlos Meneses Jiménez Javier López Renau Titulado Medio Actividades Técnicas Mant. y Ofic. G.2

Ayudante de Investigación

ALMACÉN

Mª.Jesús Puado Villalba

Ayudante de Investigación

CENTRALITA

Encarnación García-Alcañiz Fernández Mª Paz Sánchez Beato Dorado Auxiliar de Servicios Generales Auxiliar de Servicios Generales

CONSERJERÍA

Eduardo Balbas Utrillas Félix Ibáñez Salmerón Soledad Moreno Zambrano Ordenanza Subalterno Ordenanza

Capítulo 2

LABOR INVESTIGADORA

2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Gravitación: Cuantización de ondas gravitatorias y agujeros negros. Durante el año 2004 se ha continuado con éxito el estudio de la cuantización de ondas gravitatorias con polarización lineal y simetría cilíndrica, conocidas como ondas de Einsten-Rosen. Se ha proseguido con el análisis de los valores en vacío de los conmutadores del campo que describe las ondas, mediante el que se había puesto de manifiesto la existencia de grandes efectos cuánticos. Concretamente, se ha demostrado la invalidez de su expansión en potencias de la constante gravitatoria, se ha descrito su comportamiento asintótico en distintos regímenes de interés físico, se ha analizado la influencia en este comportamiento de la presencia de un cutoff en el espacio de momentos y se ha constatado la falta de equivalencia entre los resultados de las cuantizaciones de Fock perturbativa y no-perturbativa. En particular, los vacíos de estas dos descripciones cuánticas no están relacionados mediante una serie de correcciones en la constante de interacción gravitatoria. Como consecuencia, no deben esperarse las mismas conclusiones físicas cuando los efectos cuánticos de las ondas se tienen en cuenta de forma global en la geometría desde un principio o cuando, por el contrario, se introducen mediante modificaciones sucesivas. Por otra parte, se ha comprobado que en el paso a la teoría cuántica las ondas gravitatorias cilíndricas con polarización general, que incluyen a las de Einstein-Rosen, constituyen un sistema que no es renormalizable en el sentido usual, aunque sí encaja en el esquema de asymptotic safety propuesto por Weinberg y considerado por Neidermaier en este contexto gravitatorio. Además, en teorías en las que la gravedad altera la expresión de la energía respecto a la usual en un fondo plano --como ocurre para estas ondas-- se ha mostrado que aparece una incertidumbre temporal mínima en los procesos de medición efectuados de acuerdo con la descripción cuántica perturbativa. Sin embargo, este límite de resolución temporal puede desaparecer, por lo general, en la teoría cuántica no-perturbativa. Otro tipo de problemas estudiado es la elaboración de un formalimo geométrico para caracterizar las membranas del espacio-tiempo que proporcionan los horizontes de los agujeros negros. A partir del formalismo de horizontes aislados propuesto por el Prof. Ashtekar, diseñado para describir horizontes gravitatorios en equilibrio, se han deducido condiciones de contorno adecuadas para afrontar la integración numérica de las ecuaciones elípticas que aparecen en el problema de valores iniciales para espaciotiempos que contienen agujeros negros. Estas condiciones pueden ser aplicadas en relatividad numérica para obtener simulaciones con las que estudiar la evolución de ese tipo de sistemas, con la vista puesta en el problema de binarias de agujeros negros, de interés en astrofísica y en interferometría de ondas gravitatorias.

Propiedades electrónicas de nanotubos de carbono. Durante el año 2004 se han estudiado las propiedades de los sistemas híbridos formados por la inserción de fullerenos en el interior de nanotubos de carbono. Los espectros electrónicos de dichos sistemas muestran peculiaridades que no se pueden explicar por la simple hibridación de los orbitales moleculares de fullerenos y nanotubos de carbono. Una de las características más relevantes en el caso de nanotubos semiconductores consiste en la aparición de una modulación en el *gap* del espectro, que conlleva una reducción notable de dicho *gap* en torno de la posición de los fullerenos. Para dar cuenta de dicho efecto se ha introducido un modelo para los estados electrónicos de baja energía del sistema, incorporando la interacción electrostática del nanotubo con la carga eléctrica de los fullerenos. Partiendo de la base de que la modulación del *gap* se ha observado en sistemas formados con metalofullerenos cargados, se ha propuesto un mecanismo por el

que la reducción del *gap* tiene lugar por la formación de estados ligados, con niveles de energía por debajo del fondo de la banda de conducción. Los cálculos llevados a cabo han tenido en cuenta las propiedades de apantallamiento de la interacción dentro de la estructura de los nanotubos, concluyéndose que los estados ligados están localizados en una extensión espacial que es consistente con la de la modulación observada en los experimentos. El estudio realizado muestra que tal modulación debe ser sensible en general a la carga contenida en los fullerenos y a las propiedades de apantallamiento del substrato utilizado. Esto abre la posibilidad de controlar a voluntad la magnitud del *gap* en los nanotubos semiconductores, haciendo que los mencionados sistemas híbridos se sitúen como buenos candidatos para el diseño de dispositivos en electrónica molecular.

En un estudio aparte, se han investigado también las propiedades de transporte por efecto túnel en estructuras con muchas capas de nanotubos concéntricos. Dichos sistemas han demostrado tener comportamientos de la conductancia que son consistentes con un decaimiento en forma de ley de potencias de la densidad de estados a baja energía, pero con un exponente que depende del valor del voltaje aplicado al electrodo del gate, con oscilaciones de período en torno a ~ 2 V. Para explicar tal fenómeno se ha partido de un modelo apropiado para describir las propiedades de escala anómalas debidas a la interacción electrónica, pero teniendo también en cuenta la naturaleza discreta del espectro electrónico como consecuencia de la cuantización de los niveles moleculares. Dicho carácter discreto aparece también a raíz de la energía necesaria para añadir un electrón de más en la geometría finita del nanotubo, dando lugar a las propiedades del régimen llamado de bloqueo de Coulomb. La descripción llevada a cabo puede así considerarse como una interpolación entre el régimen de alta temperatura, donde la conductancia muestra el mencionado comportamiento en forma de ley de potencias, y el régimen de bloqueo de Coulomb a baja temperatura, en el que la conductancia muestra oscilaciones bajo variaciones en el voltaje del gate que son un reflejo del carácter discreto de los niveles. Los resultados obtenidos dentro del marco teórico propuesto muestran que, en el régimen intermedio, la conductancia tiene todavía un comportamiento en forma de ley de potencias como función de la temperatura, pero con un exponente que depende de la posición del nivel de Fermi en el conjunto de niveles. Se ha encontrado que las estimaciones para el período de las oscilaciones en el exponente son consistentes con el valor del período observado en los experimentos, lo que, junto con el acuerdo con otros detalles en las curvas de la conductancia, muestra la plausibilidad de la descripción de un régimen intermedio entre el de bloqueo de Coulomb y el régimen de alta temperatura de los nanotubos de carbono.

2.2 DPTO, DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

LINEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estructura Nuclear. Reacciones Nucleares. Astrofísica Nuclear. Isótopos raros.
- Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear: Núcleos con halo. Teorías de Muchos cuerpos en sistemas correlacionados.
- Modelos exactamente solubles. Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad.
- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad nucleónica. Caracterización de la estructura nuclear mediante reacciones elásticas y de ruptura así como a través de la desintegración beta.
- Estructura y dinámica microscópica de la materia condensada desordenada o nanoestructurada. Desarrollo de instrumentación avanzada para espectroscopia neutrónica. Algoritmos para visualización de datos masivos en espectroscopía neutrónica.

SUBLINEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Desintegración beta simple y doble. Transiciones de Fermi y de Gamow-Teller.
- Dispersión elástica y quasielástica de electrones. Haces polarizados y observables de polarización. Superscaling en dispersión inclusiva.
- Resonancias y estados del continuo.
- Descripción exacta de los fenómenos de superconductividad y superfluidez. Modelos integrables basados en álgebras simples. Cálculos de estructura nuclear a gran escala.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Estudio de las propiedades estructurales de núcleos con halo.
- Modelos cuánticos integrables. Simulaciones a gran escala

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Métodos de cálculo de campo medio autoconsistente.
- Métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Faddeev.
- Técnicas de diagonalización a gran escala. Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. Representación de álgebras de Lie.
- Tratamiento de reacciones nucleares. Detección en cinemática completa de todas las partículas o fragmentos, sus energías y distribuciones angulares para la reconstrucción del invariante de masas. Desarrollo propio del sistema experimental y de DAQ con más de cien parámetros. Coincidencias gamma-gamma, detección de partículas cargadas.
- Dispersión de Neutrones. Relajación de Espín Muónico. Espectroscopia Dieléctrica. Simulación Numérica.

Implicaciones de la desintegración nuclear beta en Estructura Nuclear, Astrofísica y Física de Partículas

Hemos descrito las distribuciones energéticas de Gamow-Teller (GT) y las vidas medias de desintegración beta en una serie de casos de especial interés en Estructura Nuclear, Astrofísica y Física de Partículas. Hemos utilizado para ello el formalismo teórico desarrollado con anterioridad, basado en cálculos autoconsistentes de Hartree-Fock deformado con fuerzas de Skyrme e incluyendo correlaciones de apareamiento en aproximación BCS y fuerzas residuales de tipo spin-isospin tratadas en la aproximación ORPA.

En lo que concierna la Estructura Nuclear, hemos estudiado en detalle la dependencia en la deformación de las distribuciones de GT en la región de masas intermedias de núcleos ricos en protones. Se establecieron aquellos casos de mayor interés en los cuales esta dependencia puede ser utilizada como una firma acerca de la deformación del núcleo progenitor. Algunos de estos casos, tales como ⁷⁴Kr y ⁷⁶Sr, han podido ser medidos experimentalmente en ISOLDE (CERN) y tras comparar con nuestros cálculos ha podido determinarse su deformación nuclear.

El propósito de la Astrofísica Nuclear es entender los procesos nucleares que operan en los escenarios estelares. Nuestra contribución en este campo ha sido la utilización de nuestro formalismo para describir las vidas medias de desintegración beta de una serie de núcleos exóticos ricos en protones denominados waiting points. Su importancia radica en que sus vidas medias determinan los procesos de nucleosíntesis rp o captura rápida de protones, paralizando estos procesos hasta que una relativamente lenta desintegración beta se produce. Hemos mostrado la capacidad de nuestro formalismo para reproducir la información experimental existente y por tanto para abrir un nuevo proyecto dedicado a estudiar sistemáticamente las regiones de mayor interés astrofísico,

dando predicciones para las vidas medias aún no medidas.

Existen en la actualidad diversas extensiones del Modelo Standard (SM), tales como teorías de gran unificación o teorías supersimétricas, que predicen la existencia de procesos en los que la conservación del número leptónico es violada. la observación de este tipo de procesos sería una confirmación de la necesidad de extender el SM. Los tests para establecer la necesidad de estas extensiones exigen el uso de energías más altas que las disponibles en la actualidad pero también pueden realizarse a través de medidas de gran precisión en el dominio de la Física Nuclear. Una condición básica para que esto tenga sentido es que la parte de estructura nuclear del proceso sea descrita de una forma precisa. Un caso típico es el proceso nuclear de doble desintegración beta para el que existen dos posibles tipos de decaimiento con y sin emisión de neutrinos. El primer caso es perfectamente permitido por el SM y observado experimentalmente; el segundo, aún no observado, implicaría una violación del número leptónico en dos unidades y la confirmación de que el neutrino es una partícula de Majorana masiva. Hemos comenzado a estudiar el proceso nuclear de doble desintegración beta con emisión de dos neutrinos como paso previo al estudio del mismo proceso sin emisión de neutrinos. Nuestros resultados, basados en técnicas de campo medio autoconsistente con correlaciones de apareamiento y QRPA, introducen por primera vez de una manera consistente la posibilidad de deformación nuclear. Hemos encontrado que la deformación nuclear resulta ser un mecanismo de supresión de la doble desintegración beta. Cuando la deformación nuclear del núcleo inicial y final es la misma, el elemento de matriz nuclear del proceso presenta valores máximos que decrecen rápidamente a medida que las diferencias entre esas deformaciones aumentan. Esta reducción puede ser en determinados casos crucial para obtener un buen acuerdo con las vidas medias experimentales.

Temas clave en la dispersión de electrones por núcleos

Hemos investigado distribuciones de carga en núcleos exóticos, tales como ^{6,8}He, ¹¹Li, ^{17,19}B y ¹⁴Be, así como los factores de forma correspondientes que pueden medirse en dispersión elástica de electrones por dichos núcleos. Los resultados pueden usarse como test de diversos modelos teóricos para la estructura de núcleos exóticos en posibles futuros experimentos usando colisionadores electrón-núcleo en un anillo de almacenamiento. El resultado de dicha comparación mostraría el efecto del halo ó de la "piel" de neutrones sobre la distribución de protones de los núcleos exóticos.

Hemos estudiado la ocurrencia de factorización en observables con y sin polarizaciones en medidas en coincidencia en la dispersión cuasielástica de electrones. Comenzando con el formalismo relativista de ondas distorsionadas en la aproximación de impulsos, formulamos la aproximación de momento efectivo y mostramos que ésta conduce a la factorización de diversos observables bajo condiciones específicas. Investigamos el papel que juegan la interacción de estados finales y particularmente el término spinórbita. Estudiamos la conexión con el formalismo no relativista y presentamos resultados numéricos y analíticos que cuantifican y cualifican las diferencias entre aproximaciones no relativistas factorizados y los métodos relativistas con y sin factorización. Estudiamos, en particular, funciones de respuesta y asimétricas de polarización para emisión de un protón de las capas $p_{1/2}$, $p_{3/2}$ y $s_{1/2}$ en 16 O. Examinamos el impacto de la distorsión de spin comparando resultados de los cálculos relativistas completos con los obtenidos mediante proyección de las

quadriespinoriales de energias negativas. Mostramos la gran sensibilidad de algunos observables de polarización al aumento dinámico de las pequeñas componentes. Comparamos con resultados semi-relativistas basados en la aproximación de momento efectivo y con resultados no relativistas.

Construimos una función de "scaling" $f(\Psi')$ para dispersión inclusiva de electrones por núcleos dentro del modelo CDFM (coherent density fluctuation model), que es una extensión natural del modelo de gas de Fermi Relativista para núcleos finitos, en el cual se definió la variable de "scaling" Ψ' por Donnelly y colaboradores. Los cálculos muestran que las componentes de alto momento de la distribución de momentos en CDFM y su similitud para diferentes núcleos conduce a la descripción y comprensión del "superscaling" experimentalmente observado en núcleos desde ⁴He hasta ²⁰⁸Pb. Nuestros resultados teóricos estan en buen acuerdo con los datos experimentales y satisfacen superscaling no sólo en la región -1< Ψ' <0, sino también en la región Ψ' <-1, donde el modelo de gas de Fermi fracasa.

Resonancias en sistemas de tres partículas: de las resonancias a dos cuerpos a sistemas de Borromeo

La aplicación del método de rotación compleja permite abordar de forma sencilla el estudio de las resonancias en sistemas de pocos cuerpos. en particular, este método, junto con el método de expansión adiabática en hiperharmónicos esféricos proporciona una herramienta muy potente pare estudiar los estados en el continuo en sistemas de tres partículas.

Con este procedimiento hemos completado la investigación iniciada el año anterior sobre las características de las resonancias de un sistema de tres cuerpos, y cómo éstas se ven influenciadas por las propiedades de los subsistemas binarios que los constituyen. Los estados ligados y resonancias de los subsistemas de dos cuerpos determinan de modo directo el espectro del sistema total. Como caso extremo, un sistema constituido por un core que interacciona con dos partículas ligeras que a su vez no interaccionan entre sí, va a presentar un espectro de energías dado por la suma de las energías de los subsistemas binarios (estados ligados y resonancias). de los estados a tres cuerpos así constituidos no todos ellos se corresponden con resonancias a tres cuerpos, solamente aquéllos dados por la suma de dos resonancias binarias.

Este método ha sido aplicado a la investigación de los estados resonantes de ⁶He y ¹¹Li, por lo que se refiere a la dripline de neutrones, y ¹⁷Ne en la dripline de protones. Una ventaja adicional del método es que es también aplicable cuando la interacción Coulombiana interviene en el sistema (¹⁷Ne por ejemplo), permitiendo investigar un sistema como el constituido por tres partículas alfa, a través del cual se pueden estudiar los estados resonantes del ¹²C, de gran interés por las implicaciones que puede tener en los procesos de nucleosíntesis estelar.

Otro aspecto que estamos comenzando a investigar se refiere a la forma en la que los estados resonantes se desintegran. el mecanismo de esta desintegración va a determinar la distribución energética de los fragmentos tras atravesar la barrera de potencial.

Este trabajo se ha realizado en colaboración con el grupo de Física Nuclear de la Universidad de Aarhus (Dinamarca).

El Grupo de Renormalización de la Matriz densidad (DMRG) en Física Nuclear.

El DMRG es un procedimiento de aproximación variacional que ha tenido un gran éxito en la descripción numérica exacta de redes cuánticas unidimensionales. En los últimos años se ha hecho un gran esfuerzo para adecuar el método del DMRG al estudio de sistemas fermiónicos finitos entre los que cabe mencionar electrones confinados en dos dimensiones, moléculas y núcleos. Entre todos estos sistemas, el que presenta más dificultades es el núcleo atómico por estar compuesto por dos clases de fermiones, protones y neutrones, y por ser su interacción fuerte y compleja.

En este sentido, hemos realizado algunos avances en la implementación de un nuevo algoritmo para el estudio de la estructura nuclear, basado en las técnicas recientes desarrolladas en materia condensada y química cuántica y en la incorporación del álgebra de acoplamiento de momentos angulares.

Por otro lado, revisamos el trabajo realizado en los últimos años en desarrollos del DMRG y aplicaciones a sistemas fermiónicos finitos. Este trabajo se publicó en un artículo de review "The density matriz renormalization group for finite Fermi systems" en la revista Reports on Progress in Physics.

Modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos de muchos cuerpos:

A lo largo del 2004 realizamos grandes avances en el estudio, generalización y aplicaciones de los modelos de Richardson- Gaudin (RG) a diversos sistemas cuánticos fuertemente correlacionados.

La solución de los modelos RG consiste en un conjunto de ecuaciones no lineales acopladas que no presentan mayores dificultades para sistemas bosónicos pero para sistemas fermiónicos aparecen singularidades que impiden su solución numérica. Mediante una transformación a un nuevo sistema de variables, logramos suavizar las singularidades y estructurar un algoritmo numérico para obtener soluciones para sistemas fermiónicos con un gran numero de partículas.

Los modelos de RG se basan en álgebras de rango 1, su(2) para fermiones y su(1,1) para bosones . Hemos propuesto la generalización de los modelos de RG a toda álgebra simple de rango mayor que uno. En particular, estudiamos los modelos de RG so(5) correspondientes a un álgebra de rango 2 que representan una interacción de pairing con isoespin 1 mostrando resultados numéricos para el núcleo ⁶⁴Ge. Esta nueva línea de trabajo se continuará con el estudio de modelos so(5) de superconductividad de alta temperatura y con el estudio de modelos exactamente solubles de mayor rango.

Extendimos los modelos de RG obteniendo modelos exactamente solubles que incluyen un modo bosónico que interactúa con los pares fermiónicos (su(2)) o bosónicos (su(1,1)). Estos hamiltonianos exactamente solubles representan modelos de gases atómicos fríos interactuando con una resonancia Feshbach. La solución exacta de estos modelos en un campo tan reciente contribuirá a la compresión de la física de estos sistemas. Por otro lado, estos nuevos modelos integrables generalizan el modelo de Dicke de óptica cuántica y por lo tanto pueden ser de potencial interés en esta área.

Un nuevo campo de trabajo a partir de estos desarrollos es la interrelación entre integrabilidad, caos y transiciones de fase cuánticas, que hemos comenzado a estudiar a

partir de modelos de RG con interacciones aleatorias. un primer resultado confirma numéricamente la hipótesis de Berry de que la distribución de espaciamientos de niveles en sistemas integrables debe seguir una estadística de Poisson.

Una introducción a estos nuevos modelos integrables y un resumen de algunas de sus aplicaciones más relevantes fue publicado en Review of Modern Physics , en el Coloquio "Exactly solvable Richardson-Gaudin models for many-body quantum systems".

Caracterización de los estados excitados de ¹²C próximos al nivel de Hoyle

Lejos de la estabilidad las desintegraciones beta (β), en especial las transiciones permitidas de tipo Fermi (F) y sobretodo Gamow-Teller (GT), constituyen una herramienta muy potente para investigar la estructura nuclear. Típicamente la desintegración β de núcleos al borde de la estabilidad nucleónica va acompañada de diversos modos de desintegración además del típico $\beta\gamma$. la aparición de otros modos de desintegración (emision retardada de partículas: $\beta\alpha$, βp , βn , $\beta 2 p$, $\beta 2 n$...) al alejarnos del valle de estabilidad se debe al crecimiento cuadrático de las diferencias de masa isobárica y a la reducción de la energía de separación para la emisión de un nucleón o de un agrupamiento ("cluster") de los mismos. El estudio de la estructura nuclear utilizando como herramienta la detección de partículas cargadas ha sido uno de los ejes principales de trabajo de este Grupo de Investigación.

Los trabajos realizados sobre ³¹Ar, asimetrías en A=9 y los estados excitados de ¹²C nos han permitido desarrollar técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados.

En la memoria de 2003 informábamos del estudio en cinemática completa de las tres alfas provenientes del nivel de 12.71 MeV de ¹²C que ha puesto fin a la controversia de su mecanismo de ruptura que se había debatido durante años. Sin embargo, para estudiar la ruptura a tres alfas de niveles de menor energía de excitación en ¹²C de gran relevancia astrofísica necesitábamos aumentar la sensibilidad a bajas energías reduciendo los umbrales de detección para partículas alfa. En colaboración con la empresa Micron-Semiconductors Ldt. O. Tengblad desarrolló detectores con una reducción de un factor 6 en la capa muerta (NIM A525 (2004) 438). Se han realizado dos estudios sobre los estados del 12 C en los que se han poblado estos estados a partir de la desintegración β^+ de 12 N y $\beta^ ^{12}$ B. la mejora del sistema experimental permitió caracterizar la resonancia alrededor de 10 MeV como un nivel 0⁺ a 11.23 MeV, demostrando que hay importantes interferencias entre este nivel y el nivel de Hoyle (0⁺ a 7.65 MeV). Además el estado rotacional excitado del nivel de Hoyle a 9.1 MeV que se incluía en todos los cálculos realizados hasta la fecha no se pudo confirmar su existencia. Estos resultados afectan a ritmo de la reacción de triple alfa en el escenario estelar aumentando al doble la velocidad de fusión de 3\alpha en estrellas primordiales (T<10⁸K) y reduciendo la velocidad de formación de elementos pesados en la supernova (T>10⁹K). Estos resultados saldrán publicados el 13 de enero 2005 en Nature.

Estudio de la dipolarizabilidad eléctrica del núcleo con halo ⁶He

Uno de los descubrimientos más importantes e inesperados de la Física Nuclear de los últimos años ha sido el del halo neutrónico en algunos núcleos próximos o en la línea de

estabilidad nucleónica (línea de goteo). Un estado de halo es básicamente un fenómeno umbral que resulta de la presencia de estados ligados próximos al continuo. La combinación de una energía de enlace pequeña junto con el corto alcance de las fuerzas nucleares permite al nucleón (ó cluster de nucleones) alejarse y tener una probabilidad no despreciable a distancias mucho mayores que el radio nuclear normal (= r_0 A^{1/3}, r_0 = 1.2 fm).

Nos propusimos hacer un estudio experimental y teórico, de la dispersión de los núcleos con halo a energías próximas a la barrera Coulombiana para establecer si el modelo óptico es una aproximación útil, y determinar los aspectos fundamentales de los potenciales que deben utilizarse para estos núcleos exóticos. Nuestro objetivo final es determinar el efecto de polarizabilidad dipolar, que consiste en la distorsión que sufren los núcleos durante la colisión debido a los campos eléctricos. Este efecto debe ser particularmente grande en núcleos con halo y se debe manifestar como una reducción de la sección eficaz en ángulos grandes. Este proyecto se lleva a cabo en colaboración con las Universidades de Sevilla y Huelva.

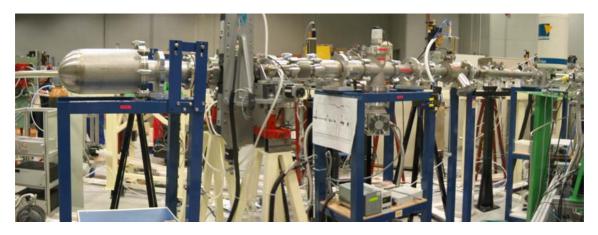
En el Cyclotron Research Center (CRC) de Louvain-la-Neuve (Bélgica) hemos medido este efecto estudiando reacciones de un haz del núcleo con halo 6 He sobre un blanco de Pb con el objeto de determinar el comportamiento de la sección eficaz elástica a ángulos grandes para energías entorno a la barrera coulombiana (PH189 y PH215). Se hizo un primer experimento en noviembre de 2002 y Diego Escrig realiza el análisis de datos correspondientes a los canales no elásticos de la reacción. Se ha determinado la dependencia de las secciones eficaces elástica y de ruptura (α +2n) con la energía para valores por debajo y por encima de la barrera Coulombiana así como su dependencia angular. Los resultados obtenidos indicaban que para distinguir entre los distintos modelos de potencial con polarizabilidad dinámica necesitábamos una mayor cobertura angular. Estas medidas se han realizado en diciembre del 2004.

Búsqueda de correlaciones octupolares en 231Ac

Dentro del estudio de núcleos pesados nos proponemos caracterizar la isla de deformación octupolar alrededor de A = 225. Experimentos previos han demostrado la existencia de deformación octupolar estable en varios isótopos de Ra y Fr, siendo de gran importancia estudiar la región de transición y observar experimentalmente cómo ocurre la desaparición de deformación octupolar en la presencia de un campo cuadrupolar bien desarrollado. Con este objetivo hemos caracterizado la estructura excitada de ²³¹Ac poblada en la desintegración beta de ²³¹Ra. Este análisis constituye una parte substancial de la tesis de Rafik Boutami. Un estudio previo caracterizaba seis transiciones gamma, la ausencia de estudio en coincidencias impedía obtener un esquema de niveles excitados. Estudios de coincidencias βγγ, βγe⁻ al igual que el estudio de espectros directos de gamma y electrones de conversion ha permitido establecer un esquema de niveles para ²³¹Ac que incluye treinta niveles hasta una energía de dexcitacion de 1.3 MeV. Utilizando la técnica de "fast timing" Byy(t) se han determinado las vidas medias de cuatro estados excitados en el rango de las centenas de picosegundos a las decenas de nanosegundos con el objetivo de determinar las probabilidades de transición reducida, B(E1) entre diferentes estados. Las probabilidades de transición reducidas B(E1) proporcionan información crucial sobre la estructura de los núcleos alejados del valle de la estabilidad y en particular sobre las correlaciones octupolares mediante la comparación de sus valores dentro de un núcleo y con respecto a transiciones equivalentes en núcleos vecinos. Los valores obtenidos para las transiciones de ²³¹Ac indican que son, en media, dos ordenes de magnitud más lentas que en núcleos de deformación permanente como es ²²⁷Ra. Podemos concluir, de este estudio espectroscópico, que en ²³¹Ac a diferencia de su núcleo padre las correlaciones octupolares ya se han desvanecido.

Objetivos cumplidos del proyecto TARGISOL:

El proyecto europeo TARGISOL (EU-project HPRI-CT-2001-50033) tiene como objetivo la optimización de las propiedades de extracción de elementos químicos en blancos radioactivos de tipo ISOL (separador de isótopos on-line). Durante este año hemos actualizado la base de datos ORACLE incluyendo datos de difusión y de adsorción de elementos químicos en matrices apropiadas para el desarrollo de blancos. la base de datos es accesible vía web a través de la URL: http://www.targisol.csic.es. Además, durante este año se ha completado la aplicación (en lenguaje PL/SQL) que crea las páginas web dinámicas tomando los datos de la base de datos. Así mismo, hemos trabajado en la validación del código Monte Carlo: "A Monte Carlo code to optimize ISOL targets" para incluirlo durante el año 2005 en la aplicación web.



Desarrollo de Métodos de Manipulación y Visualizacion de arrays multidimensionales: aplicaciones para espectroscopia neutrónica.

Nuestro objetivo aquí es contribuir a la explotación óptima de instrumentos de espectroscopia neutrónica de tiempo de vuelo (TOF) de última generación. El tipo de problemas que tales instrumentos hoy en día abordan concierne sobre todo al estudio de excitaciones estructurales (fonones, excitaciones de campo cristalino) y magnéticas (ondas de spin) en materiales de interés tecnológico (manganitas magnetorresistentes, superconductores etc.) . El problema radica en que la dimensionalidad del espacio a explorar viene dada por las tres componentes del vector transferencia de momento así como por la transferencia de energía. Además ha de tenerse en cuenta que la espectroscopia neutrónica es una técnica severamente limitada por la luminosidad alcanzable, lo que inmediatamente nos lleva a inferir la necesidad extrema de ultilizar algoritmos altamente flexibles (adaptados al problema) y eficientes en el manejo de conjuntos de datos con tamaños del orden de 2 Gbits. Los algoritmos desarrollados nos han permitido la reconstrucción de imágenes nítidas obtenidas el pasado año en un espectrómetro TOF de última generación.

Estudio de excitaciones elementales en materia desordenada

Durante el pasado año nuestro principal esfuerzo se volcó en estudios experimentales, por simulación numérica, modelado e interpretación teórica de este tipo de fenómenos en algunos líquidos de especial relevancia. En particular, concentramos nuestros esfuerzos en el análisis de la forma de línea de las funciones de respuesta espectral de dos líquidos metálicos . El primero (potasio fundido) constituye un representante de la clase de los "líquidos simples" cuyo comportamiento se pretende entender desde primeros principios. Nuestro interés particular se ha centrado en el estudio de la parte cuasielástica del espectro (con frecuencia promedio cero). Por medio de experimentos con neutrones polarizados hemos logrado la separación de la respuesta coherente e incoherente, lo cual nos ha servido para llevar a cabo un test de algunas predicciones basadas en la teoría cinética. En líquidos mas complejos como el níquel , nuestro interés se ha centrado en estudiar con detalle las contribuciones a la atenuación de las ondas de densidad, buscando obtener estimaciones de la componente de viscosidad volúmica. El asunto es de especial interés para la comprensión de observaciones geofísicas sobre las propiedades mecánicas del manto exterior al núcleo terrestre.

Dependencia anómala con la densidad de la dinámica estocástica en un líquido: Evidencia experimental de una transición líquido-líquido

Dentro de nuestra línea de investigación concerniente al estudio microscópico de correlaciones espacio-temporales en sistemas re-entrantes, y en particular en aquellos que exhiben diagramas de fase cerrados, hemos llevado acabo una serie de experimentos (I.L.L. Grenoble, Francia, KEK, Tsukuba, Japón) encaminados a la búsqueda de puntos críticos dobles (DCP) en los cuales los exponentes correspondientes a la clase de universalidad de Ising doblan exactamente sus valores. Una de las sorpresas de tal estudio lo ha constituido el descubrimiento de una anomalía en la dinámica estocástica (reorientaciones moleculares) de un componente de una mezcla binaria en la cual es esperable encontrar un DCP para valores de los campos termodinámicos (P,T) coincidentes con aquellos en los cuales la mezcla presenta doble criticalidad. Los resultados, que han sido corroborados e interpretados por medio de una simulación por ordenador, nos han permitido inferir la presencia de una transición de fase líquido-líquido en el componente puro, lo cual puede suministrar algunas claves sobe los mecanismos microscópicos responsables de la aparición de DCP.

Origen microscópico de la respuesta dieléctrica en materiales formadores de vidrios

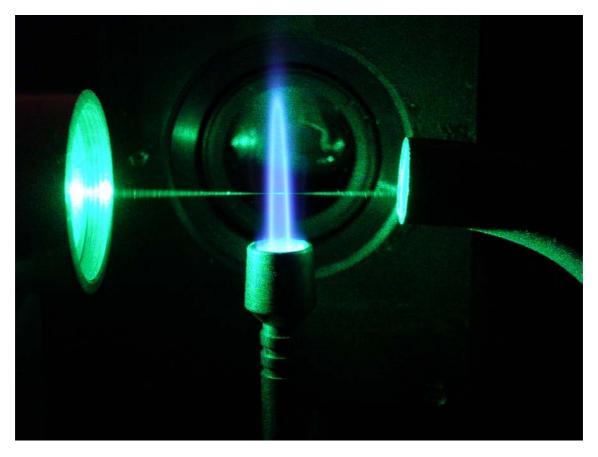
Aunque la espectrometría de relajación dieléctrica es uno de los métodos más frecuentes de caracterización macroscópica de la dinámica de cuerpos condensados, la interpretación microscópica de las magnitudes accesibles experimentalmente dista todavía mucho de alcanzar los niveles de sofisticación característicos de otras técnicas experimentales (p.ej. NMR). El problema radica en que la magnitud accesible experimentalmente no es sino el correlador del momento dipolar total (macroscópico) del material bajo estudio, que incluye contribuciones integradas espacialmente de la función dieléctrica compleja. Nuestra contribución en este campo se ha centrado en el estudio de la respuesta dieléctrica de un formador de vidrios y en el intento de correlacionar tal respuesta macroscópica con movimientos microscópicos estudiables por medio de espectroscopia cuasielástica de neutrones. Tal estudio ha estado apoyado

en resultados de simulación numérica que nos han permitido aislar la respuesta dinámica de dipolos individuales. Uno de los resultados más llamativos de tal esfuerzo ha consistido en evidenciar en la transformada de Fourier-Laplace del correlador de orientaciones moleculares de dipolos individuales estructuras similares, aunque desplazadas en frecuencia, a las que exhiben los espectros experimentales (picos, etc.). en consecuencia, tales resultados permiten explicar la aparición de fenómenos dinámicos extendidos sobre una vasta escala de tiempos en términos de una única cantidad física la cual muestra un mínimo de tres regímenes temporales claramente identificables.

Estudios en dinámica vítrea por espectrometría de muones implantados

Durante el pasado año hemos llevado a cabo estudios precisos de rotación de espín muónico (SR) en muestras que pueden ser estudiadas en detalle a través de la transición vidrio -> líquido superenfriado. Se han podido monitorizar procesos dinámicos dentro de la escala temporal $0.1-10\,\mathrm{s}$ a través de medidas del espectro de rotación de Larmor bajo campos aplicado externos de unos 20 G. la información contenida en la dependencia con la temperatura de la constante de amortiguación (similar al tiempo de relajación transversal en NMR) así como de su amplitud han permitido evidenciar sin introducir suposiciones previas, la presencia de fenómenos claramente asimilables a aquellos predichos por la teoría cinética, referentes a la existencia de criticalidad a pocos grados encima de la transición vidrio -> liquido superenfriado observable calorimétricamente.

2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR



LINEAS DE INVESTIGACIÓN:

Diagnóstico y Modelado Cinético de Plasmas Fríos.

Dinámica y cinética de reacciones químicas y de procesos de transferencia de energía. Físico-química de la atmósfera. Espectroscopía IR de hielos.

Espectroscopía FTIR.

Espectroscopía láser de alta resolución de especies de interés atmosférico y estudio de estados excitados.

Espectrocopía Raman en chorro supersónico

Espectrocopía Raman del vapor de agua

Transferencia energía R-T en colisiones moleculares inelásticas

Espectroscopía y dinámica molecular teóricas. Métodos de control cuántico. Moléculas con rotación interna. Láseres intensos.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

Espectroscopía Raman no-lineal. Doble resonancia Raman-Raman. Espectroscopía Infrarroja por diferencia de frecuencias ópticas.

Espectroscopía Raman Lineal. Chorros supersónicos. Criogenia.

Descargas en cátodo hueco. Espectroscopía visible y FTIR. Espectrometría de masas cuadrupolar. Sondas de Langmuir. Haces moleculares. Cámara de vacío con criostato para formación de hielos. Simulación por ordenador.

Diagnóstico y modelado cinético de plasmas fríos.

Se ha avanzado en el diagnóstico de plasmas de aire a bajas presiones, detectándose las especies neutras y los iones mediante espectrometría de masas cuadrupolar con o sin ionización por impacto electrónico, respectivamente, así como la densidad y temperatura electrónica, mediante sondas dobles de Langmuir. Para hacer posible el encendido de las descargas a baja presión se ha instalado un cañón de electrones. Con el fin de disponer de una mayor capacidad de cálculo en el modelado cinético de estas descargas se ha adquirido un nuevo programa informático "Facsímile". En relación con los experimentos en plasmas de H₂+CH₄+N₂, enfocados al depósito e inhibición de películas carbonadas en reactores de fusión, se han realizado mediatas "in situ" del crecimiento de estas películas mediante una microbalanza que ha sido instalada en el interior del reactor y se ha analizado mediante microcopia electrónica y XPS (X Ray Photo-Electron Spectroscopy), la composición de distintas muestras depositadas sobre substratos de acero inoxidable, en colaboración con el ISOM de la Universidad Politécnica de Madrid.

Dinámica y cinética de reacciones químicas y de procesos de transferencia de energía. (en colaboración con UCM y UPM)

Se han concluido los estudios experimentales sobre relajación rotacional de monóxido de carbono en colisiones CO-CO, CO-He y CO-Ne a bajas temperaturas (≈ 5-80 K) en expansiones supersónicas. Las evolución de la secciones eficaces de relajación rotacional con la temperatura es cualitativamente similar a la obtenida previamente para N₂ pero en la zona de más bajas temperaturas (< 20-30 K), los valores absolutos de la sección de relación de CO son sistemáticamente mayores que las correspondientes al nitrógeno. De modo análogo a lo encontrado para N₂, se observan importantes discrepancias a muy baja T con secciones obtenidas a partir de fluorescencia con haz de electrones. En el momento actual se continúa la comparación crítica de nuestros resultados con los de otros grupos. Se ha comenzado recientemente el estudio de la relajación rotacional en expansiones supersónicas de mezclas de CO y H₂.

Se ha realizado un cálculo teórico de trayectorias cuasiclásicas de la reactividad del $O(^1D)$ + D_2 a las energías de colisión de un experimento de haces moleculares cruzados realizado en la Universidad de Perugia . El acuerdo es muy bueno para la más baja de las energías estudiadas ((22,2kJ mol⁻¹) incluyendo la influencia de transiciones no adiabáticas pero se observan algunas diferencias para la energía más alta. (25.9 kJ mol⁻¹).

Se ha aplicado el método de trayectorias cuasiclásicas al estudio de la estereodinámica de la excitación rotacional en el sistema Ar+NO (j=0) a 66 meV (energía correspondiente a experimentos recientes). Para las excitaciones a los niveles mas altos posibles, correspondientes a interacciones fuertemente repulsivas, los cálculos mostraron una marcada correlación entre al sentido de giro predominante y el plano de dispersión , en acuerdo cualitativo con los resultados experimentales y de cálculos mecanocuánticos. Para excitaciones a niveles más bajos el experimento y el tratamiento cuántico predicen oscilaciones en el sentido de giro que no se obtienen con el método clásico.

Físico-química de la atmósfera. Espectroscopía IR de hielos.

El trabajo teórico se centra en el estudio de la estructura y propiedades ópticas de cristales de hielo con diversos gases de interés atmosférico (HNO₃, HCl, y otros previstos) adsorbidos en distintos grados de hidratación, así como mezclas ternarias de los mismos. Hemos realizado estudios con el programa de cálculo teórico de estructuras periódicas SIESTA (acrónimo de Spanish Inititiave for Electronic Simulations of Thousands of Atoms), mencionado en la memoria del año anterior, obteniendo predicciones para comparación y modelización de los cristales ya obtenidos experimentalmente en nuestro laboratorio.

En esta línea de trabajo teórico, estrechamente relacionada con la parte experimental que se describe a continuación, colaboran varios componentes del departamento, tanto investigadores senior, como personal de apoyo y estudiantes. Más detalles sobre esta línea de investigación y el personal que la ejecuta pueden encontrarse en la página web: http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/hielos/hielos.htm .

Esta línea de investigación ha dado lugar en el año 2004 a una serie de publicaciones, que se mencionan también en la citada página web, y más adelante en esta Memoria. Dentro de la parte experimental se han continuado los estudios de espectroscopia RAIR de capas de diversos "hielos". Se han medido espectros para láminas finas de ácido nítrico cristalino así como de sus hidratos (mono, di y trihidrato) . Las medidas del ácido nítrico se compararon con las frecuencias calculadas por medio del programa SIESTA y se obtuvo un buen acuerdo. Los trabajos experimentales más detallados se han realizado sobre el trihidrato de ácido nítrico (NAT), que es el más estable termodinámicamente y el que parece jugar un papel más relevante en la físico-química de la estratosfera. Se ha obtenido un gran conjunto de espectros para películas de NAT de distinto espesor y para distintas polarizaciones de la luz IR. El análisis de los datos sugiere que los cristales adoptan orientaciones preferentes sobre el sustrato metálico que se utiliza como soporte.

Se han llevado a cabo asímismo series de medidas y cálculos sobre el trihidrato y hexahidrato de ácido clorhídrico. la concordancia entre experimentos y teoría es satisfactoria, habiéndose enviado a publicar y aceptado ya dos artículos sobre estas especies.

Espectroscopía FTIR.

Se ha continuado la colaboración con el departamento de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos del IEM en experimentos SEIR (Surface Enhanced Infrared Spectroscopy) – transmisión y reflexión absorción – de moléculas adsorbidas sobre superfícies metálicas nanoestructuradas.

En colaboración con el departamento de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos del IEM y el departamento de Química Láser del Instituto de Química Física "Rocasolano" se ha continuado el estudio, mediante FTIR y otras técnicas espectroscópicas, del efecto de la longitud de onda del láser sobre pigmentos orgánicos e inorgánicos, en los casos de limpieza de obras de arte con láser.

Espectroscopía láser de alta resolución de especies de interés atmosférico y estudio de estados excitados.

Han concluido las medidas de ensanchamiento colisional en las líneas de la rama Q de la banda v_2 de la molécula de acetileno perturbada por Ar. Dichas medidas se realizaron a temperaturas de 295, 174 y 134 K. Los perfiles fueron ajustados con perfiles de Rautian y los coeficientes de ensanchamiento colisional, así obtenidos, comparados con los valores resultantes del cálculo mediante "close coupling" y " coupled state". La comparación de medidas y cálculo es satisfactoria y a partir de las medidas a diferentes temperaturas, mediante una simple ley de potencia, se determina la dependencia con la temperatura de los coeficientes de ensanchamiento.

Se han realizado estudios de estados vibraciones excitados mediante técnicas de doble resonancia Raman-Raman sobre la molécula de SF₆. Esta molécula que tiene influencia en el efecto invernadero, aumenta su concentración en la atmósfera a un ritmo de alrededor del 8% anual debido a la actividad industrial. Se debe resaltar que pese a que la banda v₃, hacia 948 cm⁻¹ está bien estudiada las bandas calientes en esta región, que contribuyen grandemente a la absorción y por tanto son de particular importancia para evaluar el efecto invernadero, no son aun bien conocidas. Respecto al estudio de esta molécula:

- a) Hemos concluido el estudio y análisis de la región de v_1 (hacia 740 cm⁻¹) y de numerosas bandas calientes que aparecen en esta región y que dan información acerca de otros niveles cuyas bandas calientes aparecen a su vez en la región de v_3 . Este estudio se ha extendido a la banda 2 v_1 v_1 (mediante la técnica de doble resonancia Raman-Raman) y se ha extendido también el estudio a la región de v_1 del isotopómero $^{34}SF_6$.
- b) Hemos registrado los espectros Raman estimulado de la débil banda $2v_6$ para los isotopómeros con 32 S y 34 S. Esta banda presenta el interés de que es el primer sobretono de la banda v_6 , no observada por ser inactiva en Raman e infrarrojo, pero responsable de gran número de bandas calientes que contribuyen a la absorción atmosférica.
- c) Hemos registrado los espectros Raman estimulados de las bandas v_2 y v_5 del isotopómero $^{34}\mathrm{SF}_6$. Ambas bandas presentan una débil rama Q que no se resuelve dentro de la anchura Doppler de las transiciones y que, por otra parte se complica con una compleja estructura de bandas calientes. Por este motivo fue preciso realizar los espectros de las transiciones con ΔJ distinto de 0 (correspondientes a la anisotropía del tensor de polarizabilidad) que ocupan un amplia extensión, y trabajar a baja temperatura.

El punto a) está completamente concluido y se continua trabajando en la interpretación de los resultados obtenidos en los puntos b) y c), en colaboración con la Universidad de Borgoña.

Fluidodinámica molecular

En el apartado de interpretación teórica, se ha desarrollado una metodología original, más cómoda y potente, para invertir la ecuación maestra y determinar los coeficientes

de transferencia nivel-a-nivel $(k_{i\rightarrow j})$ para colisiones inelásticas rotacionales, a partir de las medidas experimentales de los espectros Raman en chorros supersónicos. Esta metodología se ha aplicado al sistema más simple, las colisiones para- H_2 :para- H_2 , que, precisamente por su simplicidad, permiten el tratamiento más riguroso posible, y el análisis de las diferentes fuentes de error. Se ha determinado experimentalmente por vez primera el coeficiente $k_{0\rightarrow 2}$ en el intervalo de temperatura de 2 a 110 K. Posteriormente, las $k_{0\rightarrow 2}$ experimentales se han reducido a las correspondientes secciones eficaces de colisión, $\sigma_{0\rightarrow 2}$, en el intervalo de energías colisionales de 360 a 600 cm⁻¹. Los valores experimentales obtenidos, que abarcan más de 100 órdenes de magnitud, se comparan sorprendentemente bien con los valores calculados ab initio empleando los potenciales intermoleculares más recientes.

En el apartado experimental, se ha llevado a cabo un estudio completo de una llama de metano/aire en un quemador comercial, mediante espectroscopía Raman. Este estudio incluye la determinación punto a punto de las temperaturas rotacionales y de las densidades absolutas de las especies mayoritarias, N₂, O₂, CH₄, CO₂ y H₂O. Con ello se han confeccionado unos mapas preliminares de temperaturas y de distribución de especies en la llama. a partir de estos últimos es posible seguir el balance de materia a lo largo del eje de la llama. Este trabajo se enmarca en nuestro intento constante por ampliar las posibilidades actuales de la espectroscopía Raman de gases, demostrando su aplicación a sistemas no convencionales.

Por último, se ha construido, probado, e instalado una nueva cámara de expansiones de gases, especialmente diseñada para espectroscopía Raman. Con esto el laboratorio de fluidodinámica molecular dispone de un segundo instrumento completo, que se pretende dedicar preferentemente a problemas de interés astrofísico. el primer ejemplo a estudiar son las colisiones CO:CO, con vistas a determinar experimentalmente los coeficientes de transferencia nivel-a-nivel $(k_{i\rightarrow j})$ para colisiones inelásticas rotacionales en la zona de bajas temperaturas, predominantes en el medio interestelar.

2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

El departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja, DAMIR, del Instituto de Estructura de la Materia fue creado en 2003 teniendo como principal objetivo la sinergia entre la Astrofísica Molecular y la Química-Física. el campus del CSIC en Serrano presenta las infraestructuras, grupos de investigación y condiciones necesarias para la ubicación del DAMIR permitiéndonos abordar los múltiples problemas que la Astrofísica moderna mantiene abiertos y los muchos desafíos que se deberán afrontar con la nueva instrumentación que estará a disposición de la comunidad científica internacional en los próximos años. Los nuevos telescopios (ALMA, HERSCHEL, JWST) representarán una mejora, con respecto a los instrumentos existentes, de un factor 100 en resolución angular y de más de un factor 10-40 en sensibilidad. Los estudios del Sistema Solar, del medio interestelar, el origen y evolución de galaxias, y los problemas fundamentales de la cosmología, recibirán un impulso extraordinario que conducirá a un cambio cualitativo importante en nuestra comprensión de la evolución del Universo.

El análisis de las condiciones físicas del gas frío en el Universo, una de las grandes apuestas del DAMIR, requiere la observación de la emisión/absorción de moléculas abundantes como el monóxido de carbono, el cianuro de hidrógeno, el ión HCO⁺, etc. la

interpretación de dichas observaciones necesita del conocimiento de propiedades intrínsecas de las moléculas: momento dipolar, estructura de los niveles de energía, secciones eficaces de colisión con el hidrógeno molecular, etc. Esta información sólo puede obtenerse a través de medidas de laboratorio o de cálculos *ab initio* de química cuántica. La colaboración entre grupos de Astrofísica Molecular y de Espectroscopía y Química Teórica ha proporcionado resultados sorprendentes en el avance del conocimiento de la complejidad química y de las propiedades físicas de las nubes moleculares. Nuestro grupo ha detectado más del 25% de las moléculas que se conocen en el espacio. Muchas de ellas fueron descubiertas y caracterizadas en el espacio antes de ser observadas en los laboratorios terrestres (SiC, C₅H, C₆H, C₇H, C₈H, MgNC, HC₄N, C₄H en estados vibracionales excitados, etc.). Los nuevos instrumentos pondrán en evidencia una riqueza molecular en el espacio sin precedentes. La interpretación de nuevos datos requiere una preparación previa basada en la predicción de las estructuras, frecuencias e intensidades de las moléculas potencialmente interesantes.

Las experiencias de laboratorio que actualmente se realizan en el IEM y en otros institutos del CSIC en Serrano poseen un enorme interés para la interpretación de las observaciones y para la preparación de la explotación de grandes proyectos como ALMA, HERSCHEL y el JWST.

El satélite HERSCHEL es una de las "piedras angulares" de la Agencia Espacial Europea que se construye en colaboración con NASA. El telescopio es un paraboloide de 3.5 metros refrigerado pasivamente a 90 K. Se lanzará en el 2007 y estará equipado con tres instrumentos que cubrirán el dominio de 16 a 166 cm⁻¹ con resolución espectral, R, de 10⁶-10⁷ (instrumento HIFI, 16-60 cm⁻¹), R=1500 (instrumento PACS, 60-166 cm⁻¹) y R=600 (instrumento SPIRE 16-60 cm⁻¹). El instrumento HIFI es el primer receptor heterodino refrigerado a 2.7K que será lanzado al espacio. La enorme resolución espectral de este instrumento junto con la cobertura continua de frecuencias entre 500 y 2000 GHz, permitirá estudiar la evolución química del Universo con una sensibilidad y resolución sin precedentes. Los otros dos instrumentos poseen la capacidad de efectuar espectroscopía bidimensional, aunque con menor resolución espectral. Su sensibilidad permitirá estudiar las primeras galaxias que se formaron después del Big-Bang.

ALMA es un proyecto euro-americano, al que se unirá probalemente Japón en 2005. Consistirá de 64 radiotelescopios de 12 metros de diámetro trabajando en modo interferométrico con líneas de base de hasta 12 km. Estará situado en el desierto de ATACAMA, a 5000 metros de altitud. La complejidad de su funcionamiento, la necesidad de una fuerte participación industrial y las condiciones logísticas asociadas a su emplazamiento representan el desafío más importante para la radioastronomía mundial en los próximos 50 años. Este instrumento cubrirá todas las ventanas atmosféricas hasta 900 GHz (radioastronomía milimétrica y submilimétrica) y alcanzará resoluciones angulares mejores que las del HST (unos cuantos milisegundos para las mayores líneas de base y las altas frecuencias). Este instrumento se puede definir como un espectrómetro bidimensional de alta resolución espectral y angular que aportará una información única en todos los campos de la Astrofísica. España participa en el proyecto ALMA con un porcentaje del 7.5% de la contribución europea.

Los nuevos instrumetos abrirán ventanas del espectro electromagnético que son inaccesibles con los instrumentos actuales, desde el punto de vista de la físico-química del medio interestelar (galáctico o extragaláctico) dichos instrumentos van a permitir

acceder a las regiones de formación de planetas, determinar las condiciones físicoquímicas iniciales cuando los discos protoestelares y protoplanetarios se forman, etc. desde el punto de vista de la cosmología y de la astronomía extragaláctica, la sensibilidad de ALMA, HERSCHEL y el JWST van a permitir acceder a la observación de un gran número de objetos de alto redshift formados en la primera generación de galaxias después del Big-Bang. Mientras que la Astrofísica Molecular se ha limitado esencialmente a nuestra galaxia, los nuevos instrumentos extenderán el dominio de dicha rama de la Astrofísica al mundo extragaláctico (complejidad química, abundancias isotópicas, etc.).

Por otra parte el DAMIR está fuertemente implicado en el instrumento MIRI del JWST space telescope que reemplazará al Hubble en 2011-2012. El desarrollo de dicho instrumento para el infrarrojo medio permitirá a nuestro grupo abordar estudios de galaxias y del propio medio interestelar de nuestra galaxia con una sensibilidad sin precedentes.

Las principales líneas de investigación del DAMIR están expuestas a continuación:

MEDIO INTERESTELAR

El estudio del medio interestelar empezó a ser una realidad en los años setenta del siglo pasado con el nacimiento de la Astrofísica Molecular. Hasta ese momento sólo se disponía de diagnósticos para el gas ionizado (regiones HII) pero se conocía muy poco del gas frío que representa un 10% de la masa de nuestra galaxia y que contiene la "memoria histórica" de la evolución estelar en nuestra galaxia al ser el receptor de todo el material eyectado por las estrellas en las últimas etapas de su vida.

Las nubes moleculares densas del medio interestelar son las zonas de formación de estrellas. Las condiciones del gas son extremas, temperaturas del orden de 10 K y densidades de 100-10000 partículas por centímetro cúbico. Debido a esas condiciones físicas la emisión del gas atómico es absolutamente despreciable. Sin embargo, a lo largo de la evolución de esas nubes, y en escalas de tiempo del orden de 1-10 millones de años, el gas, inicialmente atómico, se transforma en molecular. La emisión de las moléculas puede ser detectada con radiotelescopios trabajando a longitudes de onda milimétricas (CO y la mayor parte de las moléculas diatómicas) y submilimétricas e infrarrojo lejano (moléculas ligeras como OH, CH, NH, H₂O, H₃O⁺, etc.).

Nuestro grupo ha desarrollado en los últimos años varias líneas de investigación en el campo del Medio Interestelar :

- Química del gas frío.
- Búsqueda de nuevas especies moleculares. Complejidad química.
- Transferencia de radiación en nubes moleculares
- Estudio de las condiciones físico-químicas de las zonas de formación estelar.
- Estudio de la formación estelar.
- Estudio de la interacción entre estrellas jóvenes de baja masa y el gas circundante.
- Estudio de la interacción de estrellas masivas con su entorno.

Para realizar dichos estudios hemos utilizado principalmente los instrumentos del Instituto de Radioastronomía Milimétrica (IRAM), el radiotelescopio del Caltech Submillimeter Observatory, el Very Large Array (VLA) y el satélite ISO.

La puesta en servicio de los nuevos instrumentos constituirá un desafío único para nuestra concepción actual de la evolución del medio interestelar desde las nubes difusas (esencialmente atómicas), pasando por las nubes moleculares (densidades de hasta 10000 moléculas/cm³) para llegar a las zonas de formación estelar. En el proceso de evolución de dichas nubes la densidad aumenta desde algunas partículas hasta la densidad típica de una estrella como el Sol (es decir 18-19 órdenes de magnitud). El tamaño de dichos objetos evoluciona desde cerca de 10¹9-10²0 cm, hasta el radio típico de una estrella, que en el caso de ser de tipo solar tendría un diámetro de 1.3 10¹0 cm (es decir, una contracción de la nube molecular de unos 10 órdenes de magnitud).

Los instrumentos actuales nos han dado una visión bastante realista de la evolución de dichos objetos hasta las escalas físicas asociadas a densidades de unas 10⁶ moléculas/cm³. Lo que ocurre a escalas más pequeñas durante el colapso gravitatorio es todavía un misterio que los astrofísicos intentaremos resolver analizando la emisión molecular del gas con los instrumentos que proporcionarán la resolución angular y la sensibilidad necesaria: ALMA y HERSCHEL.

Las principales líneas de trabajo que se seguirán en el departamento serán:

- Química de las zonas de formación estelar: análisis de las moléculas mejor adaptadas para transmitir información de dichas zonas. Selección de las mejores transiciones moleculares para trazar las condiciones físicas reinantes en esos objetos.
- Química de protoplanetesimales : Observación de las zonas más internas de objetos protoestelares. determinación de las condiciones físicas de las condensaciones de gas de masa subestelar.
- Química de la interacción del gas eyectado a gran velocidad por las nuevas estrellas y el medio circundante: dicha interacción se produce en zonas de 10¹³-10¹⁴ cm. la resolución angular de ALMA permitirá diferenciar perfectamente la zona de choque y post-choque. determinación de las condiciones físicas en cada una de ellas.
- Estudio del gas difuso : Los nuevos instrumentos permitirán observar la absorción molecular producida en las nubes difusas en la radiación de objetos que se encuentren detrás de ellas. Esta técnica ha empezado a ser utilizada en el interferómetro del Plateau de Bure. ALMA aportará una sensibilidad sin precedentes en este campo y HERSCHEL permitirá estudiar el espectro electromagnético en las zonas del infrarrojo lejano y del submilimétrico inaccesibles desde Tierra (transiciones de H₂O, CH⁺, CH, OH, etc.).
- Transferencia de radiación en 3-D : la resolución angular de ALMA permitirá distinguir la contribución de las diferentes regiones a la emisión de una especie molecular dada. el desarrollo de códigos robustos, rápidos y de probada convergencia será una de las líneas prioritarias de nuestro departamento.

- Obtención de los parámetros moleculares necesarios para la interpretación de las observaciones (secciones de colisión, intensidad de las líneas/bandas, constantes espectroscópicas) a través de cálculos ab initio. la nueva visión del Universo que proporcionará ALMA requerirá de un conocimiento mucho más preciso de los parámetros moleculares. en los próximos años nuestro departamento analizará los problemas más urgentes en el campo de la química-física de las moléculas más abundantes del medio interestelar (secciones de colisión CO, H₂O, HCN, CN con H₂ y He; frecuencias de moléculas floppy –clusters de carbón-, intensidades de las bandas de moléculas complejas como el metanol, etc.)
- Estudio de las zonas más internas de la formación de estrellas masivas: análisis
 de los procesos físicos asociados a la formación de estos objetos. Estudio de la
 complejidad química asociada a gas sometido a altas temperaturas por la
 radiación estelar o por los choques asociados a los vientos de estos objetos.
- Búsqueda de nuevas moléculas alrededor de estrellas jóvenes : Complejidad química y predicción químico-cuántica de frecuencias ro-vibracionales.
- Estudio de abundancias isotópicas como trazador de la evolución estelar (procesos nucleares en el interior de las estrellas). Tanto ALMA como HERSCHEL brindarán una oportunidad única para comprender la evolución de las razones isotópicas como una función de la distancia al centro de la galaxia. Dichos estudios permitirán establecer un conjunto de parámetros e indicadores para estudiar la evolución estelar en nuestra galaxia.
- Estudio de objetos de nuestra galaxia (centro galáctico) que puedan ser utilizados como modelo para comprender la emisión de galaxias distantes.
- Preparación del programa científico de HERSCHEL (tarea como Mission Scientist de J. Cernicharo) y del programa de tiempo garantizado (core program) del instrumento HIFI (J. Martín-Pintado).

Todas estas líneas de trabajo en el marco de ALMA, HERSCHEL y el JWST requieren una preparación preliminar que será efectuada en los próximos años a nivel observacional, teórico y de laboratorio (espectroscopía, cinética química, etc.).

MEDIO CIRCUNESTELAR

Todas las estrellas de 2-3 masas solares tienen en las últimas etapas de su vida procesos violentos de perdida de masa. En su fase de gigantes rojas desarrollan una envoltura a su alrededor que contiene los elementos producidos en el núcleo estelar. La temperatura típica del gas es de 1500-2000 K en la zona de la fotosfera estelar y evidentemente el gas es esencialmente molecular. Debido a que algunas de esas especies moleculares son refractarias y tienen tendencia a formar agregados que forman núcleos de condensación donde otras especies moleculares pueden depositarse. La presión de radiación empieza a producir una aceleración en esos esbozos de granos de polvo que empiezan a arrastrar al gas. Cuando la temperatura desciende a 800-1000 K una buena fracción de las moléculas se depositan sobre los granos de polvo produciendo un importante incremento de su tamaño y por consiguiente de la presión de radiación que se ejerce

sobre ellos. Esto, unido a la pérdida de masa producida por las pulsaciones estelares genera una velocidad suficiente para que el gas escape a la atracción gravitatoria de la estrella. La envoltura se expande y termina incorporándose al medio interestelar donde al cabo de unos cuantos millones de años terminará formando una nueva estrella. En el proceso, una fracción importante de la masa nuclearmente procesada de la estrella (>50 %) será eyectada al medio interestelar.

Las envolturas circunestelares son el mejor laboratorio químico que un espectroscopista puede imaginar. Cerca de 60 especies moleculares han sido detectadas y caracterizadas en esos objetos. La mayor parte de ellas no eran conocidas en los laboratorios terrestres y su detección e identificación ha constituido una de las grandes contribuciones de nuestro grupo a la química del medio interestelar y circunestelar. La mayor parte son radicales carbonados del tipo C_nH , C_nN y SiC_n . Recientemente investigadores de nuestro departamento han probado la existencia de poliinos y de benceno en dichos objetos. Estas moléculas son los eslabones a partir de los cuales se forman las grandes moléculas de 100-200 átomos responsables del 30-50% de la emisión de nuestra galaxia en el infrarrojo medio y cercano.

Los procesos químicos que determinan la abundancia de las moléculas en las envolturas circunestelares dependen de la distancia a la estrella. En las zonas más internas donde las reacciones a tres cuerpos son eficientes, el equilibrio termodinámico se puede aplicar y sólo las especies moleculares más estables son abundantes. Esas zonas están pobremente estudiadas ya que representan tamaños inferiores a 10^{14} - 10^{15} cm y los mejores radiotelescopios o interferómetros actuales no permiten resolverlas. en las zonas más externas la radiación ultravioleta proveniente de la galaxia permite fotodisociar especies como CO o HCN y una química similar a la del medio interestelar prevalece. Esta zona suele tener tamaños de 10^{16} - 10^{17} cm y puede ser resuelta por los instrumentos actuales. Sin embargo los procesos fotoquímicos, aunque a gran distancia de la estrella, se producen en una estrecha zona de la envoltura. Por consiguiente tampoco se conoce en detalle la secuencia de formación de las grandes especies carbonadas detectadas en estas zonas externas.

ALMA y HERSCHEL aportarán lo que los instrumentos actuales son incapaces de permitirnos: estudiar la zona de formación de los granos de polvo donde la química en equilibrio termodinámico podría dominar, estudiar la secuencia de formación de las grandes cadenas carbonadas y estudiar las especies sin momento dipolar permanente a través de sus transiciones ro-vibracionales (moléculas con niveles de baja energía vibracional). Además la sensibilidad de ambos instrumentos permitirá detectar especies moleculares que hoy en día escapan a la detección con los mejores instrumentos disponibles.

Las principales líneas de investigación del departamento con vistas a una preparación de la explotación científica de ALMA y de HERSCHEL son :

 Estudio de la complejidad química, modelos de cinética química para verificar la hipótesis de equilibrio termodinámico en las zonas más internas. Predicción de especies moleculares intermediarias para ser detectadas con ALMA y HERSCHEL. desarrollo de códigos de cinética química acoplados a la evolución dinámica de las envolturas.

- Modelos de química en la fase de evolución desde la fase AGB a la de nebulosa proto-planetaria. Fotoquímica de las moléculas carbonadas.
- Transferencia de radiación en 3-D : de la misma manera que para el medio interestelar, la resolución angular de ALMA requerirá el uso de códigos robustos de transferencia de radiación en 3-D.
- Diferenciación de la química en estrellas ricas en oxígeno (C/O<1) y ricas en carbono (C/O>1). Importancia de los procesos cinéticos para la presencia de especies carbonadas en estrellas ricas en oxígeno y viceversa.
- Estudio de la secuencia de formación de las grandes cadenas carbonadas (C₄H, C₅H, C₆H, C₇H, C₈H, ...), y de los procesos químicos que las hacen intervenir en la formación de grandes macromoléculas.
- Estudio de la emisión máser de HCN, SiO, H₂O, SiS y otras especies moleculares, desarrollo de códigos de transferencia de radiación capaces de trabajar con cientos de niveles de energía y miles de transiciones rovibracionales.
- Búsqueda de nuevas especies moleculares, complejidad química.
- Cálculos ab initio de especies moleculares de particular interés como HCN (secciones de colisión) y de los clusters de carbono C_n (espectroscopía, predicción de la posición de las bandas infrarrojas, intensidades, etc.)

ESPECTROSCOPÍA CUANTITATIVA DE ESTRELLAS CALIENTES EN EL INFRARROJO Y RADIO

La actividad investigadora del departamento abordará dos aspectos de gran relevancia dentro del campo de la espectroscopía estelar cuantitativa en el infrarrojo y radio: el estudio espectroscópico de estrellas calientes y sus correspondientes vientos estelares y la transferencia de radiación en las envolturas moleculares de estrellas evolucionadas.

Los vientos de las estrellas calientes caracterizan la distribución espectral de estos objetos desde los rayos—X hasta el infrarrojo y radio. a pesar de que dichas estrellas emiten la mayor parte de su energía en el ultravioleta, las líneas espectrales infrarrojas y la distribución del continuo en infrarrojo y radio constituyen diagnósticos excepcionales para analizar los vientos de dichos objetos. Uno de los objetivos de este proyecto será pues el análisis cuantitativo de estrellas azules luminosas observadas con el satélite ISO y su compatibilidad con otros rangos espectrales.

Para abordar el segundo de los objetivos de este proyecto se adaptarán los códigos de transferencia de radiación utilizados para estrellas evolucionadas de masa intermedia tipo AGB y proto-planetarias. Estos objetos están rodeados de una envoltura de polvo y gas molecular (H₂, CO, HCN, H₂O) y, hasta ahora, la zona de interfase entre la atmósfera estelar y dicha envoltura ha sido pobremente tratada. Esta tarea está intimamente ligada a la explotación de la base de datos de ISO relacionada con la evolución estelar, la interacción de las estrellas con el medio que las rodea así como la formación estelar. El estudio detallado de la transferencia de radiación en dichos objetos

será pues otra de las tareas específicas a realizar. Esto constituirá la base de programas de observación tanto para los futuros instrumentos del Herschel Space Observatory y de ALMA, como para los espectrógrafos infrarrojos del GRANTECAN, VLT y Keck.

La pérdida de masa de las estrellas calientes, en forma de viento estelar y presente a lo largo de la evolución de la estrella caracteriza importantes áreas de la astrofísica. Los vientos estelares modifican la radiación ionizante que escapa de la estrella y condiciona regiones del medio interestelar. La pérdida de masa altera significativamente la escala evolutiva, los perfiles químicos, abundancias y luminosidad de las estrellas. Además, caracteriza los espectros ultravioleta de galaxias lejanas y proporcionan uno de los métodos más precisos para determinar distancias extragalácticas. Es pues esencial disponer de métodos que nos permitan realizar análisis cuantitativos de las observaciones en aquellas zonas espectrales que proporcionen la información necesaria para describir dichos vientos. El infrarrojo y radio, tanto a través de medidas fotométricas como espectroscópicas constituyen una fuente privilegiada de información sobre las características del viento. Es más, son las únicas zonas del espectro disponibles en regiones de alta extinción como el centro de nuestra galaxia. Por ello con los análisis cuantitativos en infrarrojo y radio de estrellas calientes, pretendemos cumplir con los siguientes objetivos científicos:

- Establecer los diagnósticos necesarios para obtener en el infrarrojo y radio información sobre la estrella y su viento:¿Qué información proporcionan las diferentes líneas espectrales y medidas de continuo dependiendo del tipo espectral del objeto?
- Consistencia y compatibilidad de los estudios en infrarrojo y radio con aquellos en el óptico y ultravioleta.
- Obtener restricciones fundamentales a la teoría de evolución de estrellas masivas.
 Ésta debe ser capaz de reproducir las abundancias, temperaturas, luminosidades y masas resultantes de estudios espectroscópicos en los diferentes estadios evolutivos de la estrella de un modo consistente.
- Usar estrellas masivas como indicadores del grado de evolución de las galaxias y
 entornos que las albergan. Las estrellas calientes masivas son muy jóvenes y al no
 haberse desplazado prácticamente la región donde se formaron, proporcionan más
 información de la composición actual de ésta de la que se pueda obtener a partir de
 regiones HII.
- La relación WLR (momento del viento-luminosidad) como indicador de distancias.
 Basada en la teoría de los vientos causados por la radiación, esta relación permite obtener con precisión estimaciones de distancias hasta el cúmulo de Virgo. Sin embargo, este método precisa todavía una calibración adecuada a través de observaciones y análisis de estrellas en regiones de diferente metalicidad.
- Impacto de la radiación producida por las estrellas calientes en el medio interestelar.
 Obtención de una red de modelos realistas de distribución de energía de estrellas masivas como base de estudios de interacción con el medio interestelar: regiones HII, PDR, etc.

 Otro objetivo importante de este proyecto es la adaptación de los códigos de transferencia de radiación para el estudio de envolturas moleculares de estrellas evolucionadas y protoplanetarias. la existencia de campos de velocidades superiores a las del sonido requiere resolver la ecuación de transporte en el sistema de referencia de las partículas.

PROCESOS FISICO-QUIMICOS EN ASTROFÍSICA MOLECULAR

La astrofísica representa uno de los campos de aplicación más importante y eficaz del cálculo *ab initio*, técnica, que con el desarrollo de la computación, se ha convertido en herramienta auxiliar de la investigación de sistemas físico-químicos que contienen especies moleculares. El medio interestelar y las nubes circunestelares representan una fuente inagotable de nuevas especies que se forman o existen a muy bajas presiones y temperaturas, por lo que se pueden considerar como moléculas aisladas. Esta circunstancia permite estudiarlas con modelos que no consideran interacciones ambientales y permiten realizar cálculos de muy alto nivel para predecir con mucha precisión estructuras y propiedades en distintos estados excitados, así como la reactividad. En el caso de especies interestelares dificilmente sintetizables a nivel laboratorio, los datos teóricos son las únicas fuentes adicionales de información de la que se dispone.

De esta manera, los cálculos *ab initio* representan una herramienta fundamental de la astroquímica, y el medio interestelar representa una fuente de datos experimentales que permiten evaluar los métodos teóricos más sofisticados. Por esta razón, consideramos que un departamento de Astrofísica Molecular e infrarroja debe incluir un área de Estructura Molecular Teórica.

GALAXIAS Y COSMOLOGÍA OBSERVACIONAL

El grupo extragalactico de DAMIR esta interesado en el estudio de galaxias infrarrojas luminosas (LIRGs) y ultraluminosas (ULIRGs) tanto en el universo local como a distancias cosmológicas. En 2004 los principales resultados han sido:

1. LIRGs y ULIRGs en el Universo Local

Luis Colina ha aplicado técnicas de espectroscopía de campo integral e imagen infrarroja para medir masas dinámicas en ULIRGs, mediante indicadores cinemáticos de la componente gaseosa. Se ha investigado la aplicación de estas técnicas para estudiar la distribución de masa en galaxias a distancias cosmológicas, y su comparación con otros estimadores basados en la distribución estelar o en la emisión del gas molecular.

Macarena García continúa analizando las propiedades físicas y cinemáticas de una muestra de ULIRGs mediante espectroscopia de campo integral. En concreto, ha participado en diversas campañas de toma de datos con el telescopio William Herschel (Observatorio del Roque de los Muchachos), y ha realizado una estancia de larga duración en el Space Telescope Science Institute para analizar datos del Hubble Space Telescope y participar en un congreso en el que presentó como poster los resultados de los análisis.

Almudena Alonso es investigadora principal de una propuesta 27 orbitas con el instrumento infrarrojo NICMOS del telescopio espacial HST para estudiar con una gran resolucion espacial (10-50pc) los procesos de formacion estelar en LIRGs en el Universo Local. En particular se van a estudiar los cúmulos estelares jovenes y las regiones HII gigantes en función de la luminosidad de la galaxia, y del tipo morfológico (galaxias aisladas frente a galaxias en interaccion, etc). Almudena Alonso fue invitada a dar una charla en el congreso "Starburst from 30 Doradus to Lyman break galaxias" celebrado en Cambridge en Septiembre de 2004 acerca de las propiedades de formacion estelar de LIRGs en el Universo Local.

Como estudio preliminar el becario Tanio Diaz bajo la supervión de Almudena Alonso y de Luis Colina ha realizado un estudio detallado de la formación estelar en la LIRG NGC7469. Esta galaxia contiene un nucleo AGN en su centro asi como un anillo de formacion estelar con un diametro de aproximadamente 1kpc; el AGN y el anillo de formacion estelar contribuyen aproximadamente cada uno un 50% de la luminosidad bolométrica de esta galaxia. En el anillo de formación estelar se han detectado un gran numero de regiones (probablemente cumulos estelares y/o regiones HII). el objetivo fundamental de este estudio es caracterizar las propiedades (edad, masa, extincion) de estas regiones individuales de formacion estelar del anillo, ver cual es su contribucion a la luminosidad total del anillo, y en general a la luminosidad bolometrica del sistema. Para ello se estan utilizando imagenes con la mayor resolución espacial posible del HST asi como espectroscopia en el infrarrojo cercano obtenida con el telescopio UKIRT.

2. LIRGs y ULIRGs a distancias cosmológicas

Dentro del proyecto del instrumento MIRI del James Webb Space Telescope (JWST), se participa (A. Alonso, L. Colina) en los grupos científicos de Cosmología Observacional, en concreto en el de formación y evolución de galaxias y en el de detección de objetos de primera luz en el Universo.

Macarena García ha iniciado el desarrollo de simulaciones de LIRGs y ULIRGs a distancias cosmológicas tal y cómo serán detectadas por los instrumentos del JWST. Almudena Alonso continua sus trabajos como mimebro del equipo científico del instrumento MIPS en el telescopio espacial Spitzer (NASA), que empezó a obtener los primeros datos científicos a principios de 2004. Durante la primavera de 2004 Almudena Alonso realizó una estancia en Steward Observatory (University of Arizona) donde se empezaron a analizar los primeros datos científicos de Spitzer. Este trabajo culminó con la publicación de un número de artículos en un número especial de la revista Astrophysical Journal Suplement Series. Entre los resultados más importantes en referencia a LIRGs y ULIRGs se pueden destacar los siguientes:

- Las observaciones de MIPS y de IRAC (otro de los instrumentos científicos instalado en Spitzer) en el Lockman Hole y en el Extended Groth Strip nos han permitido identificar LIRGs y ULIRGs a distancias de hasta z=2.5. Estos objetos tienden a estar enrojecidos en el rango optico, y probablemente son galaxias muy masivas (M> M*), y son probablemente responsables de una gran fracción de la formación estelar del Universo a distancias cosmológicas.
- Se han estudiado tambien las propiedades de fuentes en rayos X con contrapartidas en el infrarrojo cercano (24micras). Estos objetos seleccionados en campos

cosmológicos (LH, EGS, y en Chandra deep Field) se encuentran a distancias z>0.5 hasta aproximadamente z=3. Presentan elevadas luminosidades en rayos X indicando la presencia de un AGN en sus centros. Se han estudiado las distribuciones espectrales de energía (desde el óptico hasta el infrarrojo) de estos objetos y se ha demonstrado que má de un 50% de ellos, a pesar de contener un AGN brillante tienen distribuciones espectrales de energia dominadas por emisión estelar lo cual podria indicar que la formación estelar es también responsable de una gran parte de la luminosidad infrarroja y bolométrica de estos objetos.

Las principales líneas de investigación del DAMIR en el año 2004 en el campo de la Astrofísica han sido las siguientes :

- Ouímica del medio circunestelar.
- Regiones HII.
- Transferencia de radiación en el centro de nuestra galaxia (emisión en el IR lejano de OH).
- Estudio de la formación de estrellas masivas.
- Estudio de la interacción de las estrellas con el medio circundante.
- Estudio del calentamiento del gas interestelar en el núcleo de la galaxia.
- Estudio de complejidad química en el núcleo de galaxias externas.
- Investigación en galaxias ultraluminosas infrarrojas con espectroscopia optica de campo integral.
- Investigación de galaxias activas de baja luminosidad con técnicas multifrecuencia con alta resolución espacial.
- Investigaciones espectroscópicas de estrellas calientes desde el ultravioleta al radio.

La lista de publicaciones indica los resultados obtenidos en dichas áreas.

Las principales líneas de investigación del DAMIR en el año 2004 en el campo de la Química Teórica han sido las siguientes:

Evaluación de superficies de potencial empleando métodos ab-initio. Extensión de los métodos desarrollados a blancos moleculares más complejo que H2 (CO, H2O) de interés en fusión nuclear y astrofísica. Empleo en el formalismo close-coupling de bases no adiabáticas (funciones de onda de los fragmentos en un esquema similar a DIM, pero sin parámetros empíricos).

- Estudio de procesos de transferencia de carga en colisiones ion- H e ion-H₂, concretamente los iones (en estados metaestables) C²⁺, N²⁺, O²⁺, y con iones Li⁺, K⁺ en que la anisotropía del blanco molecular es importante.
- Estudio de la aproximación súbita para el estudio de la distribución vibracional en colisiones ion-H₂, y de la relación con el formalismo IOSA, empezando con el caso H⁺ + H₂ en que se encuentran discrepancias entre los resultados experimentales y los resultados de la aproximación súbita. Estudio de la reacción H₂⁺ + H.

Se están estudiando métodos para la determinación de niveles roto-vibracionales de moléculas que poseen más de tres modos de gran amplitud que generan propiedades norígidas. Con este fin, se ha elaborado un método llamado MP2/SCF por analogía a los que se emplean en el estudio de estructuras electrónicas de sistemas polielectrónicos. El operador se resuelve autoconsitentemente y se corrigen los "errores de correlación" debido a las interacciones entre movimientos no separables, mediante Teoría de Perturbaciones de orden 2 y 4.

El método se ha aplicado ya al dimetileter y al alcohol etílico y se obtienen unos resultados muy próximos a los variacionales en las zonas de baja densidad de estados. El método permite reproducir las diferencias de energía debidas a los desdoblamientos de los niveles vibracionales por efecto túnel. En la actualidad, se está empleando para el estudio de la glicina que posee cuatro movimientos de gran amplitud inseparables.

Para zonas de alta densidad de estados se está desarrollando un método CCSD.

Para la determinación de Superficies de Potencial mediante métodos ab initio que conllevan optimización de la geometría, se ha estudiado y propuesto una solución al problema de la simetría estática.

Espectroscopía molecular

Se están determinando las estructuras de mínima energía y los niveles rotovibracionales de las moléculas de glicoaldehido y glicina detectadas en el medio interestelar. Se están determinando propiedades espectroscópicas y estructurales.

Se ha concluido el estudio torsional de varias variedades isotópicas del propanal con la corrección vibracional del punto cero. Se ha concluido también el cálculo del espectro FIR correspondiente a la torsión del resto aldehídico deuterado en una serie de derivados sustituidos del furfural.

Estudio ab initio de moléculas implicadas en procesos de fotosíntesis y de interés para el aprovechamiento de la energía solar.

Estos estudios se insertan en un proyecto de colaboración con el Centro de Energía Solar (CIES) de Santiago de Cuba. Se están realizando cálculos ab initio y DFT de las estructuras y frecuencias vibracionales correspondientes al estado fundamental y a los primeros estados excitados que puedan intervenir en los procesos de transferencia electrónica fotoinducida de ftalocianinas y porfirinas y derivados sustituidos metálicos.

Se está desarrollando metodología que permita la determinación mediante métodos ab initio de propiedades implicadas en los procesos de transferencia electrónica fotoinducida

Espectros vibracionales y rotaciones de interés astrofísico y atmosférico.

En colaboración con varios grupos europeos, se están estudiando las estructuras, los procesos de isomerización y de los espectros vibracionales en 3N-6 dimensiones de moléculas de interés astrofísico que contienen silicio (SiNH₂, HNSiH, NSiH₂). También se están estudiado pequeñas cadenas hidrocarbonadas (C₄) e hidrocarburos policíclicos aromáticos.

Desarrollo de metodología para estudiar ionización en colisiones ión-átomo / molécula empleando modelos atómicos.

Comparación de los mecanismos, probabilidades y secciones eficaces de captura al continuo en colisiones ión multicargado – átomo utilizando métodos clásicos y cuánticos

Procesos de transferencia de carga en colisiones iones en estados excitadoss metaestables H₂ en que la anisotropía del blanco es importante.

Procesos de intercambio de carga entre iones multicargados y H₂, D₂, DT, T₂ a estados vibracionales específicos y para distintos estados vibracionales del canal de entrada

CONTRIBUCIÓN AL DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN INTERNACIONAL

Atacama Large Millimeter Array (ALMA)

- Estudio de viabilidad para la construcción de los paquetes de trabajo asignados al Ministerio de Ciencia y Tecnología.
- Desarrollo y prueba del sistema de calibración del plano focal basado en lámina semitransparente.
- Desarrollo del simulador del interferómetro, de la librería de efectos atmosféricos para uso en la calibración de fase y amplitud.
- Grupo de Coordinación Técnica del ALMA con sede en Instituto de Estructura de la Materia

Heterodyne Instrument for the Far Infrared (HIFI) embarcado en el satellite Herschel

- Desarrollo de herramientas para el análisis de mapas de la emisión molecular a gran escala realizados con la técnica de cartografía rápida.
- Rediseño del "framework" dentro del Herschel Common Software System del

Herschel

- Diseño y elaboración de herramientas del análisis rápido dentro de Instrument Control Center (ICC) del HIFI.
- Participación en la elaboración del programa científico del HIFI.

Mid InfraRed Insturment (MIRI) del James Webb Space Telescope (JWST)

• Estudio de viabilidad de la contribución española a MIRI. desarrollo en INTA del diseño preliminar del simulador criogénico del telescopio.

2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Espectroscopía infrarroja de correlación 2D y estructura de la proteína P₂₂ del virus HCV (Proyecto BQU2003-01690).

Se ha puesto a punto un nuevo accesorio para realizar in-situ intercambio isotópico H/D de proteínas y ácidos nucleicos en células de líquidos para medida de espectros infrarrojos de transmisión. La necesidad de este accesorio se justifica porque generalmente se suele disponer de cantidades muy pequeñas de sustancias biológicas para realizar el referido intercambio y obtener así espectros dinámicos que sirvan de base para el estudio de estructuras por espectroscopía óptica de correlación bidimensional y análisis de componentes principales. El accesorio combina los elementos usuales de una célula convencional para líquidos, pero combinados con dos membranas de diálisis y unas características geométricas adecuadas para obtener una cinética de intercambio H/D en el disolvente apropiado. Este accesorio se ha utilizado para el estudio de la estructura terciaria de la proteína P₂₂ por espectroscopía infrarroja de correlación bidimensional en disoluciones diluídas (20-30 mg/ml).

Estructura de proteínas y agua en alimentos reestructurados de pescado. (Proyecto Europeo SEAFOODplus, FP6-506359).

Se ha estudiado por espectroscopía Raman la estructura de proteínas y del agua en pescado reestructurado con fibra dietética con el fin de conocer las bases moleculares de los cambios en los atributos que determinan la calidad de estos alimentos. Del estudio comparativo entre surimi y sus geles se advierte en éstos últimos la formación de entrecruzamientos a través de enlaces de hidrógeno en láminas β intermoleculares y enlaces hidrofóbicos entre cadenas laterales de proteínas. Sin embargo, no aparecen cambios significativos en la estructura del agua en ambos tipos de alimentos reestructurados. Finalmente, la adición de fibra dietética de trigo genera un cambio estructural de α -hélices a láminas β en los geles de surimi y un incremento en la proporción de agua ligada que puede estar asociado a un aumento en la capacidad de retención de agua. Se realizará una regresión multivariante para saber si existe correlación alguna entre ambos tipos de parámetros.

Espectroscopía Raman e Infrarroja sobre superficies metálicas rugosas (SERS y SEIR): Estudio teórico y experimental de la intensificación de los espectros vibracionales

Uno de los logros fundamentales de este proyecto ha sido la preparación de superficies nanoestructuradas metálicas con mejores prestaciones para ser empleadas en la intensificación SERS y/o SEIR. Las nanopartículas de plata obtenidas por reducción química con hidroxilamina han demostrado unas propiedades interesantes en relación con la técnica SERS por: a) su mayor actividad desde el punto de vista electromagnético, en determinadas regiones del espectro electromagnético, b) poseer una mayor adherencia para ser inmovilizadas sobre superficies de vidrio, c) no presentar interferencias por parte de sustancias contaminantes, y d) presentar una morfología y tamaño más homogéneos. La inmovilización de agregados activos de partículas de plata permite estabilizar los soportes metálicos empleados y la posibilidad de preparar películas metálicas con diferentes espesores y grados de rugosidad, lo que ha permitido controlar mejor las características morfológicas de estos sistemas nanestructurados. Las películas de nanoagregados de plata se probarán en el futuro con la técnica SEIR.

La funcionalización de las superficies metálicas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas como tioles y polímeros orgánicos (politerephtalatos y calixarenos) ha permitido el diseño de superficies que manifiestan una gran selectividad respecto a analitos determinados, abriendo una línea de trabajo interesante y prometedora, al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos.

Se ha puesto a punto un método de empleo conjunto de las técnicas SERS y micro-Raman confocal en el estudio de complejos entre fármacos y biopolímeros. Para ello se ha descrito un método que permite la distribución homogénea del complejo a estudiar sobre la superficie de las nanopartículas metálicas permitiendo aumentar las condiciones de reproducibilidad de las medidas SERS microscópicas. Este método se ha aplicado para los fármacos antitumorales hipericina, emodina, dantrona y quinizarina publicándose con éxito los resultados alcanzados. Este método se ha aplicado también al estudio de cromosomas politénicos de las glándulas salivares de *Chironomus thummi*, permitiendo la caracterización de las diferentes regiones del cromosoma. Esta técnica se espera aplicar para el caso de interacción entre este tipo de cromosomas y fármacos.

Se ha comenzado a aplicar un nuevo método de preparación de nanopartículas metálicas mediante la llamada fotorreducción in situ mediante irradiación láser de plata iónica sobre un soporte adecuado. Mediante el control de parámetros, como la potencia del láser, el tiempo de irradiación y la concentración de la sal de plata empleada, se puede controlar el tamaño y la forma de las nanopartículas metálicas inducidas mediante este método. Las partículas obtenidas se han caracterizado mediante microscopía electrónica de barrido y se ha probado su eficacia SERS respecto a adsorbatos de conocida actividad para ser comparados estos soportes con los convencionales.

Sensores químicos basados en nanoestructuras metálicas: detección de pesticidas en alimentos por espectroscopia SERS

Se ha aplicado la técnica SERS sobre electrodos de plata y cobre en el estudio del pesticida diquat, de uso frecuente en agricultura para entender con más detalle sus propiedades electroquímicas, así como los procesos de transferencia entre el pesticida y las superficies metálicas, con el fin de dilucidar los mecanismos de intensificación Raman que tienen lugar sobre dichas superficies. Estos resultados se han comparado

con los obtenidos sobre coloides para mejor caracterizar las nanopartículas coloidales en cuanto a propiedades fisicoquímicas de su superficie.

Caracterización de sustancias húmicas del suelo mediante espectroscopía SERS y fluorescencia

Se ha aplicado la técnica SERS en el estudio estructural de las sustancias húmicas del suelo extraídas de suelos tratados con diferentes fertilizaciones durante treinta años. Los resultados se han comparado con los obtenidos con la espectroscopía de fluorescencia, IR y RMN encontrándose una interesante correlación entre ellas. Asimismo, se ha empleado la técnica micro-Raman confocal en el estudio de estas mismas sustancias húmicas, lo que ha permitido entender los espectros Raman en más detalle.

Identificación de hidrocarburos aromáticos policíclicos traza mediante espectroscopia vibracional amplificada por superficies

Los calixarenos se han aplicado con éxito en la detección selectiva de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) ya que interaccionan con ellos, permitiendo el acercamiento de dichas moléculas a las citadas superficies Se han ensayado diferentes calixarenos, en los que se han variado el número de unidades aromáticas, y los grupos químicos empleados para el anclaje de los mismos sobre el metal y para interaccionar con los analitos a detectar, con el fin de encontrar una relación entre la estructura del receptor, la eficacia de anclaje, el límite de detección y la selectividad del reconocimiento molecular que se pone en juego. Se han estudiado en detalle condiciones experimentales que conducen a una mayor eficacia en esta detección, encontrándose que el empleo de pequeñas concentraciones del receptor calixareno son más adecuadas. Los sistemas optimizados se han enfrentado con diferentes PAHs, en los que el número de anillos aromáticos y su distribución varía encontrándose una relación estructural entre los receptores y los ligandos. En particular, se ha visto que aquellos PAHs que presentan estructuras tipo "bahía" (como benzo[c]fenantreno), que son los de mayor actividad carcinogénica, interaccionan más fuertemente con los calixarenos de cuatro unidades bencénicas dando lugar a menores límites de detección.

También se han empleado las superficies funcionalizadas con calixarenos para el análisis mediante la espectroscopía SEIR, encontrándose resultados complementarios respecto a los obtenidos con la técnica Raman.

Técnicas láser aplicadas al estudio y a la conservación y restauración de obras de arte y monumentos

Hemos continuado, en colaboración con las Dras. Martín y Castillejo del Instituto Rocasolano, la utilización de las técnicas FT-Raman, FTIR, LIBS y LIF, para caracterizar la composición de diversos pigmentos usados en distintos tipos de policromías. Asimismo, se ha estudiado el efecto de la radiación láser de diferentes longitudes de onda sobre dichos pigmentos y demás compuestos de la policromía.

Se ha continuado con la aplicación de técnicas vibracionales de superficie (SERS y SEIR) al estudio de pigmentos orgánicos de interés para el estudio del Patrimonio Histórico Artístico. Para ello se han caracterizado vibracionalmente los pigmentos orgánicos: alizarina, ácido carmínico, curcumina e índigo carmín, obteniéndose los correspondientes espectros SERS a diferentes condiciones de longitud de onda de

excitación, concentración de los pigmentos, pH, y sobre diferentes superficies metálicas. En este estudio se ha hecho especial hincapié en el efecto de la radiación láser sobre estos pigmentos, y su posible relación con técnicas láser empleadas en la restauración de objetos artísticos. Se han empleado los nuevos sustratos nanoestructurados metálicos en el estudio de los pigmentos alizarina y ácido carmínico, encontrándose interesante diferencias entre ellos.

En relación con los pigmentos orgánicos se ha empleado un método de inclusión en silicatos modificados mediante grupos orgánicos (ORMOSILES) lo que atenúa considerablemente la fluorescencia de los pigmentos incluidos en ellos. Estos ensayos se han hecho para los pigmentos alizarina, ácido carmínico y mezclas de ambos, encontrándose una manifiesta especificidad en la absorción del pigmento alizarina por parte de los ORMOSILES.

Las técnicas espectroscópicas vibracionales se han aplicado con éxito en el estudio de materiales de construcción de interés para el Patrimonio Histórico Artístico. En concreto, hemos enfocado nuestra atención en los tratamientos que se aplican de forma usual en la consolidación y la protección de las superficies externas con el fin de asegurar la conservación de las piedras naturales y artificiales que constituyen el Patrimonio Histórico. Dichas superficies se encuentran sometidas a diferentes agentes (contaminación, lluvia, aire, etc..) que pueden modificar tanto las propiedades del material como las del tratamiento aplicado. Las espectroscopias IR y Raman han permitido caracterizar tanto los procesos de polimerización de los tratamientos superficiales, como las posibles modificaciones experimentadas por los mismos. El carácter no destructivo de estas técnicas las hace ser de gran valía para el estudio de los materiales que no pueden ser dañados, como son los materiales del Patrimonio. La utilización conjunta de la microscopía óptica y la espectroscopía Raman ha permitido realizar estudios in situ sobre la evolución de los tratamientos, con gran precisión, analizándose, asimismo, el poder de penetración de estos tratamientos.

Fotónica de Plasmones Superficiales y ondas guiadas

En relación con la línea sobre Fotónica de plasmones superficiales en Nano-estructuras metálicas, se ha continuado el estudio teórico basado en las ecuaciones reducidas de Rayleigh (para la condición de contorno de impedancia en un plano) de la dinámica de propagación y *scattering* de pulsos de polaritones (tipo plasmón superficial, PPS) sobre superficies metálicas con defectos submicrométricos, de enorme interés en NanoÓptica. En particular, se ha profundizado en el fenómeno del *scattering* resonante, que se manifiesta en retrasos en los pulsos y colas exponenciales relacionadas con la vida media de las resonancias, explorando resonancias en defectos rectangulares.

También relacionado con la Fotónica de PPS, se ha iniciado el estudio teórico del *scattering* de PPS en el régimen de THz sobre semiconductores dopados. En particular, se ha trabajado estrechamente con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de la Universidad de Aachen para estudiar la existencia de un gap de PPS en superficies de silicio dopado, estructuradas con líneas de agujeros rectangulares periódicamente distribuidos. Se ha logrado un magnífico acuerdo con sus resultados experimentales, reproduciendo el coeficiente de transmisión, la posición y amplitud del gap, así como la disminución de la velocidad de grupo.

Dentro de la línea de investigación del estudio teórico del mecanismo electromagnético (EM) en espectroscopía SERS, se ha desarrollado un modelo para introducir de manera rigurosa la señal emitida a la frecuencia Raman por la molécula adsorbida sobre el substrato metálico, sobre la base de la formulación exacta del problema de scattering de ondas EM conocida como formulación de las ecuaciones integrales de superficie (teorema de Green). Previamente se había considerado la intensificación de dicha señal idéntica a la sufrida por el haz de bombeo sobre la superficie del substrato, que es la que de hecho excita los modos vibracionales de la molécula. Nuestro modelo trata de incorporar en el vector de polarizacion a la frecuencia Raman desplazada dos configuraciones: películas Langmuir-Blodgett y moléculas aisladas. Se ha comenzado ya a implementar dicho modelo en los cálculos para explorar la intensificación SERS en diversos substratos metálicos nano-estructurados.

Estudio de la Ablación inducida por radiación láser infrarroja.

Dentro del Proyecto que estamos desarrollando en estos momentos y en colaboración con el grupo de trabajo con el que está coordinado, estamos llevando a cabo un estudio de los procesos de ablación inducidos en el compuesto SiO por un número de campos láseres cuyas longitudes de onda de emisión abarcan desde el infrarrojo medio (10.53 µm) hasta el UV (248 nm). El objetivo final de este trabajo es profundizar en los mecanismos básicos que tienen lugar en los procesos de ablación, de gran utilidad en estos momentos en aplicaciones tecnológicas.

Nosotros hemos estudiado la ablación inducida en la región del infrarrojo medio mediante láseres de CO₂. A partir de estudios dinámicos en la pluma de expansión hemos obtenido la temperatura translacional de las especies SiO formadas y mediante Fluorescencia Inducida por Láser (LIF) hemos calculado la temperatura rotacional con que se forman dichas especies. Estos resultados, obtenidos para una fluencia de ablación de aprox 3 J/cm², apuntan a que, en estas condiciones, existe una partición equilibrada de la energía interna, como corresponde a un proceso térmico. Para fluencias de ablación menores, aunque también tiene lugar un proceso térmico, la cantidad de especies SiO producidas es demasiado pequeña como para que tenga lugar un equilibrio colisional. En estas condiciones obtenemos un valor menor de la temperatura rotacional, en acuerdo con la menor energía disponible para ser distribuida entre los diferentes grados de libertad. En este caso, la energía contenida en la cola del pulso de CO₂ produce una evaporación adicional que influencia los valores calculados para la temperatura translacional. Además, hemos encontrado que la ablación inducida en el infrarrojo medio da lugar a la formación de silicio microcristalino en el sustrato, lo que no ocurre en el proceso inducido por radiación de otras longitudes de onda.

Fotoquímica de los procesos de deposición de fases nanométricas inducidos por láser.

Hemos continuado el estudio de la deposición de aglomerados metálicos de tamaño nanométrico encapsulados en estructuras poliméricas de silicio. Como molécula precursora del elemento metálico, Fe, utilizamos el pentacarbonilo de hierro (Fe(CO)₅) pues, es conocido que su disociación produce átomos de Fe y, además, tiene una banda de absorción en la región de 5 µm que es accesible para nosotros sumando las frecuencias de dos láseres de CO₂ en un cristal doblador de AgGaSe₂. Como precursor del polímero de silicio utilizamos el silaciclopenteno (SCP) que, por resultados

obtenidos anteriormente, conocemos que mediante Disociación Multifotónica Infrarroja (DMI), irradiándolo en la región de 10 µm, produce dichas estructuras poliméricas. Hemos irradiado diferentes mezclas de ambos precursores con diferentes longitudes de onda. Los resultados muestran que la composición de la mezcla no determina la composición y características de los depósitos obtenidos. Sin embargo, las longitudes de onda de irradiación producen resultados diferentes. Se han utilizado dos configuraciones de irradiación: a) Doble irradiación simultánea, 2λ, utilizando dos longitudes de onda, 10.53 y 9.24 µm, resonantes exclusivamente con el SCP y b) Triple irradiación simultánea, 3λ , en la que, además de las 2λ , se irradia simultáneamente con la longitud de onda de 4.92 µm resonante con el Fe(CO)₅. La caracterización de dichos depósito se realizó por diferentes técnicas como micro-Raman confocal, TEM, EDX y difracción de electrones. Para ambas configuraciones de irradiación se obtuvieron depósitos de nanopartículas de Fe rodeados de una matriz polimérica de silicio, a través de la cual se extiende de manera no homogénea grafito cristalino. En ambos casos las nanopartículas resultaron estar compuestas de Fe en su fase α. El tamaño de estas partículas depende de la configuración elegida, siendo de ≈ 70 nm para 2λ y ≈16 nm para 3λ. En esta última configuración la concentración de c-grafito es mucho mayor alrededor de las nanopartículas de Fe, observándose también en estas muestras la presencia de magnetita y a-Si_{1-x}C_x. Se constató que la composición del depósito resultó dependiente de la configuración de la irradiación.

Se iniciaron también estudios previos para la obtención de depósitos de Se en matrices poliméricas. Se ha estudiado en tiempo real la DMI del dimetilselenio para confirmar la presencia de CH₂=Se como producto transitorio tal como ha sido propuesto por J. Pola et al. Para ello hemos empleado fluorescencia inducida por láser (LIF) y espectroscopia de emisión utilizando una cámara ICCD. Hasta este momento y en las condiciones experimentales utilizadas no ha sido posible detectar dicha especie mediante LIF; por el contrario y para presiones mucho más elevadas existen indicios prometedores de su existencia al analizar la quimioluminiscencia con la cámara ICCD.

Estos trabajos han sido realizados en colaboración con el grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa) y con el de C. Ballesteros del Dpto. de Física de la Universidad Carlos III de Madrid.

2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Se ha continuado con el proyecto MAT2002-01242 que en su vertiente aplicada se conecta con el proyecto etileno-estireno (ES4) financiado por Repsol-YPF y que actúa como EPO del proyecto MAT. La actividad del grupo en el área de síntesis de polímeros a lo largo del año 2004 se ha centrado en la producción de copolímeros de etileno en presencia de catalizadores de centro activo único. Se ha utilizado un amplio rango de estructuras catalíticas diferenciadas, tales como catalizadores metalocénicos, "half-sandwich", de geometría restringida y postmetalocénicos. El objetivo de este trabajo es doble. Por un lado, se intenta establecer correlaciones entre la estructura del catalizador y la arquitectura molecular del copolímero resultante. Por otro lado, se pretende estudiar cual es el efecto de la incorporación del comonómero en las propiedades físicas (tales como temperatura de fusión, cristalinidad, módulos elásticos, etc.) de los polímeros

resultantes. En este sentido, se han utilizado 10 catalizadores diferentes para la síntesis de copolímeros de etileno/estireno, etileno/1-hexeno y etileno/dodeceno.

En cuanto a las relaciones estructura catalizador e incorporación de estireno en el copolímero se ha encontrado que los catalizadores de geometría restringida basados en titanio [(Me₂Si)Cp(N^tBu)]-TiCl₂) incorporan una mayor cantidad de comonómero. Sin embargo, los catalizadores "half-sandwich" CpTiCl₃ y los catalizadores postmetalocénicos no son capaces de formar copolímeros obteniéndose solamente polietileno. En los catalizadores de tipo metalocénico se ha observado una influencia del tipo de puente y de los ligandos aromáticos. Se ha visto que catalizadores basados en puente de silicio tienen altas actividades pero con una baja incorporación de estireno, mientras que los basados en puentes de carbono producen mayores incorporaciones de comonómero, aunque con menor actividad catalítica. Por otro lado, los ligandos aromáticos mas voluminosos (p.e indenilo o fluorenilo) dan lugar a copolímeros con mayor peso molecular comparado con los ligandos menos voluminosos (p.e ciclopentadienilo).

Paralelamente, a este trabajo experimental, se han realizado trabajos de modelización y simulación asistida por ordenador de las reacciones de copolimerización de etileno-estireno. En estos estudios se ha usado el modelo teórico B3LYP/LANL2DZ para obtener los perfiles energéticos para la reacción de copolimerización. Para ello se seleccionaron dos de los catalizadores de diferente estructura, el catalizador de geometría restringida y el metaloceno rac-bis(tetrahidroindenyl) de zirconio(IV. El catalizador de geometría restringida tiene una menor actividad y una mayor incorporación de estireno que el catalizador metalocénico. Los resultados teóricos están en buen acuerdo con algunos hechos encontrados experimentalmente tales como la perdida de actividad del catalizador cuando se incorpora estireno en la alimentación del reactor y la ausencia de secuencias de bloque de comonómero.

Por otra parte, se ha realizado un estudio 3D-QSAR ("3-Dimensional Quantitative Structure Activity Relationship") de un conjunto de catalizadores metalocénicos basándonos en la metodología generalmente usada en la industria farmacéutica para la síntesis de nuevos principios activos. Esta metodología pretende establecer correlaciones entre una propiedad del catalizador, que en nuestro caso es la actividad catalítica y el peso molecular del polímero formado, con parámetros o campos tridimensionales que dependen de la estructura del catalizador. Para ello se han utilizado dos tipos series de catalizadores realizadas cada una de ellas bajo las mismas condiciones experimentales. De este modo, se han obtenido un modelo estadístico con capacidad predictiva en base al cual se pueden invocar numerosas modificaciones estructurales que pueden ser usadas en el diseño de catalizadores. Además, esta ha sido la primera vez que se ha usado la metodología 3D-QSAR en el estudio del comportamiento catalítico de compuestos metalocénicos.

Por otro lado, se ha llevado a cabo un profundo estudio de la relación estructurapropiedades en copolímeros semicristalinos de etileno/1-hexeno y de etileno/estireno obtenidos mediante este tipo de catalizadores. Entre los aspectos más novedosos hay que destacar la validez de estos materiales como polímeros modelo a la hora de establecer la dependencia de las propiedades y las características moleculares, micro- y nanoestructurales. También se han obtenido resultados muy interesantes desde un punto de vista más tecnológico, que conciernen a problemas típicos que se presentan en las poliolefinas durante los procesos de transformación. En el caso de los copolímeros 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 laterales. La combinación de las técnicas de calorimetría diferencial de barrido, dispersión de rayos X a ángulos altos 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 de la zona cristalina. Realmente, lo que se ha observado experimentalmente es la existencia de distintos grados de rigidez en los materiales, dependiendo, en gran medida, de la cantidad de ramificaciones laterales en la cadena de polímero. Esta característica deja su impronta en las propiedades macroscópicas. Así, las propiedades mecánicas como el módulo de Young varían dependiendo de la fracción presente en cada una de las fases que forman el material y de la interacción existente entre las mismas. También se ha estudiado el comportamiento exhibido por las mezclas de polímero lineales y ramificados. Los resultados más interesantes ponen de manifiesto que, si bien se logra una interacción segmental en el estado fundido entre las distintas especies moleculares tras el proceso de mezcla, se produce un fenómeno de segregación durante el proceso de cristalización. Por otro lado, la presencia de ramificaciones en los copolímeros afecta enormemente al proceso de cristalización isotermo, aunque se llega a establecer un comportamiento universal de la velocidad de crecimiento esferulítico con la temperatura de cristalización. Esto ha permitido desarrollar un nuevo método analítico para la estimación de la temperatura de fusión en el equilibrio, del que se extrae una dependencia lineal dela misma con la cantidad en ramificaciones. El estudio reológico básico de los copolímeros de etileno/1-hexeno ha permitido definir el estado de enmarañamiento de los distintos sistemas poliméricos en el fundido, dependiente principalmente de la estructura química. Se ha visto como afecta la cantidad de la rama lateral introducida por el comonómero en la flexibilidad de la cadena polimérica, y por tanto en su dinámica y en la dependencia de las propiedades viscoelásticas con la temperatura. Se está llevando cabo un estudio similar para distintas familias de copolímeros de etileno/estireno, con objeto de establecer los posibles similitudes o diferencias que causan cadenas laterales de diferente naturaleza, caracterizadas por estructuras químicas más rígidas y con un mucho mayor volumen estérico que las generadas por el 1-hexeno.

Desde el punto de vista más tecnológico los resultados de mayor interés conciernen a la eliminación de las distorsiones durante los procesos de extrusión en este tipo de polímeros mediante la adición de muy pequeñas cantidades de polietileno de peso molecular muy elevado. Parece ser que, si las condiciones de mezcla son las adecuadas, las especies de muy alto peso molecular son capaces de crear una superestructura que hace que la dinámica de los fenómenos de distorsión (relacionada con la dinámica molecular) se vea ralentizada, y que las propiedades elásticas de los sistemas poliméricos se vean fuertemente potenciadas. Si esto es cierto, es de esperar un efecto crítico del peso molecular de la especie en la creación de dicha superestructura. Los últimos resultados obtenidos en el grupo en sistemas de mezcla con especies de distinto peso molecular apuntan en esta dirección. Estos resultados abren posibles vías para resolver un problema que ha estado presente en la ingeniería de extrusión de poliolefinas a lo largo de los últimos 30 años y que se ha acentuado por el doble efecto de utilizarse mayores velocidades de deformación en los procesos industriales, por un

lado y por el otro, por la incorporación al mercado de nuevos materiales con arquitecturas mejor definidas y distribuciones moleculares más estrechas.

Cristalización en materia condensada blanda

- Cristalización 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 cristalización de 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 muestras de polyetilentereftalato (PET) en un amplio espectro de frecuencia. Los resultados obtenidos permiten proponer un modelo de distribución heterogénea de laminillas cristalinas.

- Cristalización en líquidos mediante detección simultánea de difracción de neutrones y espectroscopía dieléctrica.

En un intento de profundizar en los fenómenos de cristalización en materia condensada blanda hemos comenzado una nueva línea de investigación encaminada a la detección simultánea de difracción de neutrones y espectroscopía dieléctrica. Para ello hemos construido, en colaboración con la Dra. Mónica Jiménez-Ruiz del Institute Laue-Langevin (ILL) de Grenoble, Francia, una célula especial que permite la realización de los experimentos mencionados. La nueva técnica ha sido probada con éxito en el ILL para el estudio de la cristalización del isopropanol. Los experimentos realizados han permitido proponer un modelo de cristalización que implica la existencia de un paso previo a la formación de cristales consistente en la ruptura de la red de puentes de hidrógeno característica de los alcoholes.

- Cristalización en nanofilms poliméricos.

Mediante experimentos de difracción de rayos X en incidencia rasante realizados en nuestro laboratorio hemos estudiado el orden cristalino en una serie de películas delgadas de polihidroxibutirato (PHB) preparadas mediante la técnica de "spin-coating". Se ha podido verificar que cuando los espesores son menores que unas decenas de nanómetros las películas presentan un carácter esencialmente amorfo. Para espesores más gruesos las películas presenta el carácter semicristalino típico del PHB. Los resultados se han explicado considerando la interacción polar entre el polímero y el sustrato vítreo que reduce la movilidad molecular e inhibe la cristalización.

Procesos de conducción en nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

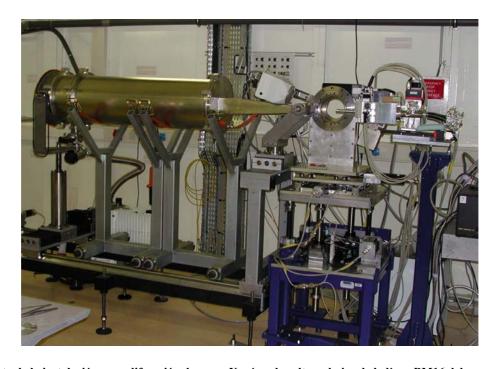
Dentro de la actividad de nuestro grupo en la red europea "Carbon Nanotubes" (CNT-network) se han realizado estudios de conductividad eléctrica en nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono de pared simple (Single Wall Carbon Nanotubes, SWCNT) y polybutilentereftalato (PBT). Se ha puesto de manifiesto que los volúmenes críticos de percolación en estos sistemas son mucho menores que los observados en composites tradicionales basados en negro de humo o grafito.

Dinámica Molecular en polímeros amorfos

Se ha continuado con la investigación sobre la dinámica molecular en materiales poliméricos amorfos mediante la técnica de Espectroscopía Dieléctrica de Banda Ancha. En este aspecto se han estudiado las relajaciones por encima y debajo de la transición vítrea, α y β respectivamente, de una serie de copolímeros aromáticos. La extensión de las medidas en un ancho rango de frecuencias, desde 10^{-1} Hz hasta 10^9 Hz, y de temperaturas, desde 120 K hasta 500 K, ha permitido probar la validez del modelo de acoplamiento (coupling model) para explicar la coalescencia de las relajaciones α y β a altas temperaturas.

Instrumentación para la línea de luz sincrotrón BM16 del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) de Grenoble, Francia.

Se ha finalizado la instalación en la línea BM16 del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) de Grenoble, Francia de la instrumentación necesaria para complementar con la técnica de difracción de rayos X a ángulos altos la existente en la mencionada línea consistente en difracción de rayos X a ángulos bajos. La instalación realizada permitirá la realización simultánea de experimentos de difracción de rayos X a ángulos altos y bajos.



Vista de la instalación para difracción de rayos X a ángulos altos y bajos de la línea BM16 del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) de Grenoble, Francia

Investigaciones sobre la cristalización no-isotérmica en materiales poliméricos compuestos

En colaboración con el Profesor Privalko del Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences, Kiev, Ucrania, se ha efectuado un estudio sobre la cinética de cristalización de polietileno de alta densidad inyectado en molde con distintas concentraciones de micro-partículas de caolín, mediante calorimetría diferencial. La cinética de cristalización no-isotérmica del polietileno aislado, así como la de los materiales compuestos, se puede describir satisfactoriamente mediante una

ecuación de Kolmogorov-Avrami modificada. La dependencia que ejerce la temperatura al inicio de la cristalización sobre la velocidad de enfriamiento se ha discutido en base al modelo de nucleación secundaria. Del análisis de los resultados obtenidos se desprende la existencia de cambios significativos en la estructura local del estado fundido en las cercanías de la interfase de micro-partículas de caolín/polímero.

Estudios sobre la morfología y los mecanismos de deformación plástica en copolímeros y aleaciones poliméricas

En colaboración con el Profesor Michler de la Universidad de Halle-Merseburg, se ha realizado, utilizando la microscopía electrónica, una investigación sobre la correlación entre la morfología y los mecanismos de deformación de una serie de copolímeros de etileno-octeno y sus mezclas con polietileno (PE) de alta densidad. Dependiendo del contenido de 1-octeno, los copolímeros presentan diversas formas morfológicas, desde estructuras laminares hasta dominios macroscópicos de tipo cilíndrico. Las mezclas sólidas de estos copolímeros con PE presentan una estructura de fases separadas que es consistente con la fusión y cristalización de los componentes individuales. Las aleaciones poliméricas han sido caracterizadas mediante estudio de sus propiedades mecánicas y micromecánicas. El examen de los cambios estructurales inducidos en las mezclas polímero/copolímero revelan que para tensiones mecánicas grandes la deformación de la fase blanda de los copolímeros de etileno-octeno viene acompañada por una rotación de paquetes de laminillas según la dirección de la deformación y la fragmentación posterior, dando lugar a nanoestructuras de bloques cristalinos con una morfología fibrilar constituida por hileras de nanocristales altamente orientados.

Se ha estudiado, asimismo, la morfología de mezclas de copolímeros en bloque de estireno-butadieno mediante técnicas de microscopía electrónica, así como su correlación con las propiedades mecánicas de estos materiales. Los resultados obtenidos indican que el mecanismo de deformación de estos sistemas que presentan una morfología de fases continua, se modifica significativamente por la presencia de cadenas lineales de los homopolímeros poliestireno y polibutadieno, lo que se refleja en una disminución de las propiedades mecánicas macroscópicas. La gran desviación de las propiedades mecánicas (tensión de fluencia, microdureza) de la ley de aditividad se ha asociado con la existencia de procesos de flujo local a escala nanoscópica inducidos por la morfología de nanofases existente.

Finalmente, se han investigado las propiedades micromecánicas de mezclas de copolímeros en bloque de estireno/butadieno con poliestireno (PS) en un amplio rango de composiciones. En particular, se ha examinado la relación entre la morfología, las propiedades mecánicas (tensión de fluencia y módulo elástico) y la microdureza. La estructura laminar del copolímero en bloque se asemeja a la nanoestructura de polímeros semicristalinos con morfología laminar. De los resultados obtenidos se desprende que la microdureza depende del espesor de las laminillas de PS. De acuerdo con las predicciones de Tabor y de Struik, se ha evidenciado una relación lineal entre los valores de la microdureza y las propiedades mecánicas macroscópicas.

Nuevos avances en el estudio de los mecanismos de deformación plástica en poliolefinas de muy baja cristalinidad

En colaboración con el Profesor V. Mathot, de la Universidad Católica de Lovaina, se han investigado las propiedades micromecánicas de una serie de copolímeros etilenoceteno con alto grado de ramificación. Los valores de microdureza obtenidos en estos materiales son notablemente más bajos que los encontrados en un polietileno lineal o ramificado.

Se ha medido por primera vez la microdureza de un sistema poliolefínico con un grado de cristalinidad por debajo del 0.5% (cercano a cero). Los resultados obtenidos se han analizado a la luz de conceptos termodinámicos que permiten describir la microdureza como la micro-deformación necesaria para deformar mecánicamente un nanocristal. Del análisis de los resultados obtenidos, se deduce que la resistencia mecánica a la deformación en polímeros de muy baja cristalinidad se define en base a los siguientes modos de deformación: 1) rotación de enlaces en las moléculas de la fase amorfa; 2) compresión elástica de nanocristales y 3) deslizamiento de los nanocristales dispersos en la matriz amorfa. Este último modo de deformación viene modulado por la viscosidad de la fase amorfa. Según estos modos de deformación, las dimensiones de los bloques cristalinos no se ven afectadas después de la deformación mecánica. Finalmente, se ha demostrado que la energía disipada durante la deformación elastoplástica disminuye al aumentar el número de ramas en las moléculas del sistema.

Estudio de mecanismos micromecánicos que inducen estructuras de alta tenacidad

Se ha continuado la investigación sobre la variación de las propiedades mecánicas de polipropileno isotáctico (iPP) mediante una deformación plástica uniaxial. Se ha investigado la morfología de muestras de iPP con distintas fases polimórficas (α, β) y el mecanismo de deformación a distintas temperaturas mediante técnicas de microscopía electrónica. El aumento de la resistencia a la fractura mecánica del material en la fase β se ha atribuido a los mecanismos micromecánicos que se inician en la fase amorfa intercristalina. Se ha demostrado que la nanoestructura del polímero, que viene definida por el tipo de empaquetamiento de las laminillas cristalinas, provoca cambios significativos en el comportamiento mecánico del material. Por debajo de la temperatura de transición vítrea, los procesos micromecánicos responsables de las propiedades mecánicas superiores de PP en la fase β quedan impedidos. A estas bajas temperaturas tiene lugar la formación de microgrietas que provocan una notable disminución de la tenacidad y conducen al comportamiento frágil del material.

Investigaciones sobre las propiedades micromecánicas de superficie en membranas de seda

En colaboración con el Profesor Eby de la Universidad de Akron, se han realizado medidas de ultramicroindentación para medir la microdureza y el módulo elástico de membranas de seda (Bombyxmori) obtenidas a partir de dispersiones acuosas mediante evaporación a temperaturas entre 20 y 80°C. Las membranas presentan valores de microdureza por encima de 400 MPa, es decir, por encima de los valores de la mayoría de polímeros sintéticos (50-300 MPa), lo que implica la presencia en estos sistemas de una gran resistencia a las deformaciones mecánicas. Los valores del módulo elástico obtenidos son del mismo orden que los medidos mediante métodos macroscópicos en membranas y fibras (7-11 GPa). Se ha puesto en evidencia, asimismo, la correlación existente entre las propiedades micromecánicas y las dimensiones nanoscópicas de los granos y nanofibrillas. Los resultados obtenidos amplían el rango de las predicciones de Struik entre la microdureza y el módulo elástico, según la expresión H=0.55E^{0.74}. Por otra parte, no se ha observado ninguna relación entre las propiedades micromecánicas y la rugosidad superficial de las membranas de seda. Finalmente, los resultados obtenidos indican que la recuperación elástica de las membranas de seda es una función creciente de la fuerza aplicada.

Estudio de la morfología y propiedades micromecánicas de materiales poliméricos compuestos: mezclas de polimetacrilato de metilo con micropartículas de caucho natural

Se han investigado las propiedades micromecánicas de mezclas de polimetacrilato de metilo (PMMA) y caucho natural preparadas a partir de soluciones en disolventes aromáticos (tolueno) mediante medida de la microdureza. Se ha encontrado una correlación entre las variaciones de dureza y la temperatura de transición vítrea (Tg). Asimismo, se han investigado la influencia de la temperatura y el grado de deformación mecánica en las medidas de dureza superficial. La inclusión de micropartículas de caucho en la matriz de PMMA provoca un reblandecimiento del material compuesto. Se ha investigado la variación de propiedades micromecánicas en la interfase polímero/partícula de caucho. Los resultados obtenidos indican que H disminuye drásticamente en la interfase. En el caso de materiales deformados uniaxialmente se observa una anisotropía de la dureza que aumenta gradualmente con el grado de deformación, siendo la anisotropía mecánica mayor para el material compuesto que para el polímero aislado. Este resultado es una consecuencia de la alta orientación de las moléculas de PMMA en la periferia de las partículas de caucho deformadas.

Finalmente, se ha investigado mediante microscopía electrónica de barrido la interfase de los materiales compuestos en ausencia y en presencia de un compatibilizador (resina epoxi). Las medidas microscópicas revelan una clara diferencia de la interfase entre la superficie sin compatibilizador (interfase continua) y con compatibilizador (interfase bien definida). La técnica de la microdureza en combinación con la microscopía de barrido emerge pues como una herramienta muy precisa para la evaluación cuantitativa de la naturaleza y calidad de la interfase en materiales poliméricos compuestos con microaditivos.

Investigación sobre la naturaleza de la línea de soldadura en materiales vítreos procesados por inyección en molde

En colaboración con el Profesor Mennig de la Universidad de Chemnitz, se ha investigado, mediante medidas micromecánicas, la naturaleza de la línea de soldadura en materiales inyectados en molde en los que se utilizan dos flujos de inyección del mismo material en estado fundido en sentidos opuestos que pueden controlarse independientemente. Se ha estudiado la influencia de la temperatura del fundido y de la posición de la indentación producida por un diamante a través de la línea de soldadura en muestras inyectadas de policarbonato y poliestireno. Para ambos polímeros y a bajas temperaturas, la microdureza del material sufre una fuerte disminución en la línea de soldadura en una zona estrecha seguida de un aumento de carácter simétrico. Para temperaturas del fundido mayores, durante el proceso de invección en molde, la disminución de H en la línea de soldadura del material invectado es mucho menor. Los resultados obtenidos revelan que la temperatura de procesado afecta a la anchura de la línea de soldadura, debido a las condiciones de interdifusión mutua de las cadenas poliméricas provenientes de los dos frentes de flujo del fundido opuestos. En conclusión, de acuerdo con investigaciones previas realizadas en nuestro laboratorio, la técnica de la microdureza permite caracterizar, con gran precisión, la región a través de la línea de soldadura en polímeros inyectados en molde. Los factores principales que afectan a la calidad de la línea de soldadura son, por una parte, la T_g del polímero y por otra las temperaturas de fundido y de inyección durante el procesado.

Propiedades eléctricas de transporte y nanoestructura de monocapas de moléculas de oligómeros orgánicos: transistores moleculares

En colaboración con el Profesor M. Pilkuhn de la Universidad de Stuttgart, se han preparado nanocapas de cadenas alquílicas de 18 unidades CH₂ y con diferentes grupos terminales depositadas en una superficie de silicio. La estructura de estos sistemas se ha investigado mediante reflectometría de rayos X a ángulos bajos. Los resultados obtenidos se han analizado en base a un modelo de 2 capas: una capa de espesor constante que es común a las muestras cadena alquílica-Si, mientras que la dimensión de la 2ª capa varía con el tamaño y naturaleza de los grupos finales. Las propiedades de transporte eléctrico de las capas se han estudiado utilizando contactos Au/Al depositados en los grupos funcionales de final de cadena. La naturaleza aislante de las cadenas alquílicas se refleja en voltajes de ruptura elevados (breakdown) de hasta 20 MV/cm. La conductancia superficial, paralela a los grupos finales, se ha medido por vez primera en el caso de un grupo bifenilo.

Se han diseñado, asimismo, transistores moleculares mediante sublimación en vacío de oligotiofenos con distinto número de anillos. El comportamiento de conducción eléctrica se ha investigado en vacío y en atmósfera ambiente. Mediante microscopía electrónica de barrido, se ha investigado la influencia del número de unidades monoméricas y de los finales de cadena en la morfología de estos sistemas. Las variaciones morfológicas, en función de la estructura molecular, son notables y parecen influir en el comportamiento de las propiedades de transferencia de carga de estos sistemas. Las características eléctricas corriente-voltaje medidas in situ y ex-situ presentan una región lineal y una región de saturación de corriente eléctrica. Sin embargo, después de la exposición de las muestras al aire se observa un fuerte aumento de la corriente, debido al efecto dopante de las moléculas de oxígeno. Variaciones en espesor de las muestras de 10 a 120 nm dan lugar a una pequeña variación en la corriente eléctrica de drenaje en vacío, indicando que la mayor parte de la conducción en el transistor molecular tiene lugar cerca de la interfase con el soporte aislante (SiO₂). Se han medido valores del voltaje umbral, la movilidad del efecto del campo, la transconductancia y la densidad de portadores de carga. La densidad de portadores aumenta en un factor 10 después de la exposición de las muestras al aire. El valor mayor de movilidad de efecto de campo que se ha observado ha sido para la molécula con 5 anillos de tiofeno, que tenía la concentración más baja de portadores de carga $(4.8 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{Vs})$.

Síntesis y caracterización de nanoestructuras autoensambladas en superficies

La ciencia y la tecnología de los materiales de dimensiones nanométricas constituyen áreas de investigación de carácter interdisciplinar y desarrollo relativamente reciente en el tiempo. Sin embargo, el crecimiento de su actividad ha sido explosivo, debido a las expectativas que se han creado acerca de posibles innovaciones de carácter revolucionario tanto en los procesos de producción como en las funcionalidades de los dispositivos. Los avances tecnológicos alcanzados hasta el momento en industrias como la microelectrónica han impuesto una tendencia continua hacia una mayor miniaturización de los componentes. Esto se ha conseguido hasta ahora mediante un enfoque "top-down". Sin embargo, al acercarse el límite atómico los costes de desarrollo de nuevas tecnologías y de producción crecen de un modo exponencial. Es por ello que se están abriendo paso en la actualidad nuevas estrategias tipo "bottom-up", en los cuales se comienza por formar los bloques constituyentes, de tamaño nanométrico y con la funcionalidad requerida, para después ensamblarlos a fin de

producir el material deseado. La comprensión de los procesos de auto-ensamblaje y auto-organización en superficies supondría un salto adelante muy importante en nuestro conocimiento de una serie de fenómenos de amplia trascendencia.

Este proyecto se plantea en base al estudio de diversos sistemas moleculares autoensamblados en superficie con intereses tanto fundamentales como de aplicación, principalmente como bio-sensores o dispositivos magnéticos. Los objetivos consisten en caracterizar en primer lugar los procesos de crecimiento y auto-ensamblaje, para pasar con posterioridad a intentar controlar a voluntad la estructura y el empaquetamiento de las unidades constituyentes mediante agentes externos. Así, se pueden distinguir tres lineas de investigación fundamentales en este proyecto: 1) Estudio de sistemas intrínsecamente nano-estructurados; 2) Estudio del proceso de nano-ordenamiento de los sistemas autoensamblados depositados sobre un substrato plano. 3) Por último, se realizarán depósitos sobre substratos nanoestructurados.

Capítulo 3

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

3.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Longitud Mínima y Holografía: Implicaciones en Cosmología y Analogías en el Laboratorio.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, BFM2001-0213

Investigador Principal: Guillermo A. Mena Marugán

Objetivos: Implicaciones Cosmológicas y en Análogos de Materia Condensada de

Escalas Invariantes y Límites de Resolución para Gravedad Cuántica.

Periodo: 01/02-12/04

Agujeros Negros y Ondas Gravitacionales: Aspectos Cuánticos y Semiclásicos.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, BFM2002-04031-C02

Investigador Principal: J. Fernando Barbero González

Objetivos: Cuantización de Sistemas con Ondas Gravitatorias y Agujeros Negros;

Análisis de Formulaciones Numéricas.

Periodo: 10/02-9/05

Acción Integrada: Quantization of Cosmological Models and Gravitational Waves.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, HP03-140

Investigador Principal: Guillermo A. Mena Marugán y Paulo Vargas Moniz

Objetivos: Cuantización de Modelos Cosmológicos y Sistemas con Ondas

Gravitatorias.

Periodo: 01/04-12/05

Horizontes en Relatividad General: Dinámica, Métodos Numéricos y Analogías en Materia Condensada

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MEC, FIS2004-01912

Investigador Principal: Guillermo A. Mena Marugán

Objetivos: Estudio en Relatividad General, Relatividad Numérica y Análogos en

Materia Condensada de Horizontes de Agujeros Negros.

Periodo: 2005, concedido.

Superconductividad en nanotubos de carbono

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, BFM2003-05317

Investigador Principal: José González Carmona

Objetivos: Investigación a nivel microscópico del origen de la superconductividad en

los nanotubos de carbono Periodo: 12/03-11/05

Métodos de teoría de campos aplicados a materia condensada

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Acuerdo de cooperación CICYT-INFN Investigador Principal: José González Carmona

Objetivos: Aplicación de métodos de grupo de renormalización en el estudio de

propiedades electrónicas de nanotubos de carbono

Periodo: 2004

3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Procesos Electrodébiles y Núcleos Exóticos

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, BFM2002-03562

Investigador Principal: Pedro Sarriguren

Objetivos: desintegración beta en núcleos exóticos. Dispersión de electrones por

núcleos. Núcleos con halo.

Periodo: 2002-2005

Nuevos Estudios sobre Propiedades de la Estructura Nuclear y Reacciones Nucleares

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Comisión mixta CSIC/Academia de Ciencias de Bulgaria

Investigador Principal: Eduardo Garrido Bellido

Objetivos: Nuevos estudios sobre propiedades de la Estructura Nuclear y reacciones

nucleares

Periodo: 1-Enero-2004 a 31-Diciembre-2005

Métodos analíticos y numéricos exactos en Física Nuclear y otros sistemas fuertemente correlacionados

Entidad Financiadora y Código o Referencia: DGI, BFM2003-05316-C02-02

Investigador Principal: J. Dukelsky

Objetivos: Estudio y generalización de los modelos de Richardson-Gaudin y aplicaciones a física nuclear y materia condensada. Aplicaciones del Grupo de Renormalización de la Matriz densidad a la estructura nuclear.

Periodo: 2004-2006

Métodos analíticos y numéricos para el estudio de núcleos alejados de la línea de estabilidad

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CICYT - IN2P3

Investigador Principal: J. Dukelsky

Objetivos: desarrollo de métodos analíticos basados en los modelos integrables de Richardson-Gaudin y de métodos numéricos a partir de la aproximación del Grupo de Renormalización de la Matriz densidad para tratar núcleos muy alejados de la línea de estabilidad.

Periodo: 2004-2005

Selected topics in nuclear structure

Entidad Financiadora y Código o Referencia: OTAN (NATO GRANT PST. CLG. 978158)

Investigador Principal: E. Moya de Guerra

Objetivos: Temas de interés actual en estructura nuclear, en particular el estado de

apareamiento para T=0 y T=1

Periodo: 2001-2004

Física Nuclear con Neutrinos

Entidad Financiadora y Código o Referencia: deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG418SPA112/8/05)

Investigador Principal: E. Moya de Guerra

Objetivos: Estudio de procesos de interacción débil en núcleos, en particular

desintegración doble β y dispersión de neutrinos por núcleos.

Periodo: 2003-2004

Estructura de los núcleos N = Z de masa a > 70

Entidad financiadora y código de referencia: CICYT-IN2P3

Investigador Principal: Mª José García Borge

Objetivos: determinar a partir del estudio de la desintegración beta la distribución de fuerza Gamow-Teller y deducir de la comparación con cálculos teóricos el signo de la deformación.

Periodo: 1 de Enero 2004 al 31 de diciembre 2005

Caracterización de núcleos ligeros y medios: su estructura y modos de desintegración

Entidad Financiadora y Código o Referencia:: CICYT (Proyecto: FPA2002-04181-C04-02)

Investigador Principal: María José García Borge

Objetivos: Estudio de los núcleos resonantes ⁷He y ¹⁰Li para conocer mejor el paso de sistemas poco ligados al continuo. También se investiga la polarizabilidad dipolar de los núcleos con halo ⁶He y ¹¹Li.

Se estudia la distribución de fuerza Gamow-Teller en la desintegración de ⁹C, pues resultados previos revelan grandes asimetrías con respecto a la desintegración de su núcleo espejo ⁹Li. Esta desintegración es tan compleja que entendemos que el problema puede ser observacional y no estructural. Además esta desintegración es relevante por ser el único caso en que se puede determinar la naturaleza de las transiciones superpermitidas.

Periodo: 1 octubre 2002 al 30 septiembre 2005

TARGISOL. Extracción optimizada de blancos ISOL – TARGISOL

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Proyecto Europeo HPRI-CT-2001-50033

Investigador Principal: Olof Tengblad

Objetivos: Optimización de las propiedades de extracción en los blancos ISOL (separador de isótopos on-line) con el desarrollo de haces de nuevos elementos (no disponibles en la actualidad en ninguna instalación ISOL) y de isótopos más exóticos, así como el perfeccionamiento de los haces existentes en actividad, pureza y reproducibilidad. Para ello se realiza una base de datos con las propiedades de extracción conocidas (datos de difusión y desorpción), y se emplea en la simulación del proceso de extracción de nuevos isótopos.

Periodo: 1 noviembre 2001 al 31 octubre.2005

Estudio de Espectroscopía (gamma, alfa y beta) de actínidos

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CICYT -IN2P3 Investigador Principal: Olof Tengblad (IEM, CSIC, España)

Objetivos: la colaboración del Grupo de Física Nuclear del IEM con el grupo de CSNSM surge con el objetivo de realizar estudios espectroscópicos en la zona de los actínidos empleando para ello los detectores de la instalación Jurogam <u>GREAT</u> de Jyväskylä, Finlandia

Periodo: 1 de Enero 2004 al 31 de diciembre 2004

Contribución al Experimento ISOLDE del CERN

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CICYT (Proyecto: FPA2002-11069-E) Investigador Principal: Mª José García Borge

Objetivos: Sufragar los gastos de representación como miembro del Comité de Colaboración de ISOLDE y de cuota.

Periodo: 11 junio 2003 al 10 de junio 2004

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CICYT -IN2P3

Investigador Principal: María José García Borge (IEM, CSIC, España)

Objetivos: Realizar medidas en GANIL dedicadas a medir con alta sensibilidad las ramas de emisión di-protónica y de 3p desde los estados excitados de ³¹Cl. Este proyecto sufraga los gastos de la colaboración Burdeos-Madrid para preparar el experimento.

Periodo: 1 de Enero 2004 al 31 de diciembre 2005

Desarrollo de un analizador de imagen y un sistema de multiplexación para espectroscopía neutrónica de tres ejes.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT (FPA2001-2817)

Investigador Principal: F. J. Bermejo

Objetivos: Incremento de la eficiencia de contaje en experimentos de espectroscopia

neutrónica

Periodo: 2001-2004

Estructura y dinámica microscópica de sistemas nanoestructurados

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT (MAT-2002-04540-C05-03)

Investigador Principal: F. J. Bermejo

Objetivos: Estudio de los efectos de la reducción de las dimensiones espaciales sobre propiedades físicas básicas en sistemas nanoestructurados.

Periodo: 2003-2006

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Efectos de la incorporación de nitrógeno en la deposición por plasma de películas carbonadas sobre paredes metálicas

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Consejería de Educación y Cultura, C.A.M. 07N/0058/2002

Investigador Principal: Isabel Tanarro

Objetivos: Estudio de los procesos de formación y erosión mediante deposición química asistida por plasma de los recubrimientos de carbono amorfo hidrogenado en paredes metálicas para reactores de fusión termonuclear.

Periodo: 1 Enero 2003 – 31 Diciembre 2004

Control de erosión química e inhibición de la formación de co-depósitos de carbono/hidrógeno en plasmas de fusión

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Dirección General de Investigación, Ministerio de Ciencia y Tecnología, FTN2003-08228-C03-03

Investigadora Principal: Isabel Tanarro

Objetivos: desarrollo y caracterización de películas de baja Z (C, Li, B) producidas por deposición química asistida por plasma, para recubrimientos del reactor TJ-II. Estudio de NH₃, Li y N₂ como "scavengers" de iones y radicales, para inhibir la formación de depósitos hidrocarbonados ricos en tritio en los divertores de reactores de fusión tipo Tokamak.

Periodo: 1 Diciembre 2003 – 30 Noviembre 2006

Reaction Dynamics (EU Research and Training Network).

Centros participantes: Universidades de Oxford, Nijmegen, Bielefeld, Perugia, München (Technische Universität), Stuttgart y Madrid (Complutense)

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Unión Europea (HPRN-CT-1999-0007)

Coordinador: P Casavechia (Perugia)

Investigador Principal parte española (UCM): F. J. Aoiz

Participante IEM-CSIC: Victor J. Herrero

Objetivos: Cooperación de grupos europeos en estudios teóricos y experimentales

de Dinámica de reacciones.

Periodo: 2000-2004

Físico-química atmosférica: contaminación urbana y procesos en la alta atmósfera

Entidad Financiadora y Código o Referencia: SGPI, MCYT (REN2000-1557) Investigador Principal: R. Escribano

Objetivos: Estudio sobre los procesos físico-químicos que acontecen en distintas capas atmosféricas: determinación de la composición de partículas atmosféricas urbanas (troposfera); estudio en el laboratorio de procesos de destrucción de ozono (estratosfera); y estudio de plasmas de aire a baja presión y de óxidos de nitrógeno (ionosfera). Se utilizan técnicas de espectrometría de masas y espectroscopia de infrarrojo y Raman, así como cálculos teóricos de simulación de los experimentos.

Periodo: 2001-2004

Obtención de Parámetros espectroscópicos de la atmósfera

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, DG Investigación, nº REN2002-01618

Investigador Principal: Dionisio Bermejo

Objetivos: Realizar en el laboratorio medidas espectroscópicas de alta resolución de especies de relevancia en procesos fisicoquímicos atmosféricos y que son objetivos de misiones de observación basadas en técnicas espectroscópicas.

Periodo: 2002-2005

Contribución experimental a la fluidodinámica molecular

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT (DGI) BFM2001-2276

Investigador Principal: Salvador Montero Martín

Objetivos: determinación de coeficientes de transferencia colisionales nivel-a-nivel

en flujo supersónico

Periodo: diciembre 2001 a diciembre 2004

Producción, detección, estructura y cinética de clusters de hidrógeno molecular

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MEC FIS2004-02576

Investigador Principal: Salvador Montero Martín

Objetivos: Estudio experimental de la formación de clusters de hidrógeno,

determinación de su estructura, y establecimiento de su cinética.

Periodo: diciembre 2004 a diciembre 2007

Control Cuántico de Procesos Moleculares

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT BFM2001-2315

Investigador Principal: Juan Ortigoso

Objetivos: Investigación teórica de las posibilidades de control cuántico de procesos

inducidos en moléculas mediante láseres intensos.

Periodo: 2002-2004

Calculations Of The Rotation-Torsion Spectrum Of Molecules With Asymmetric Top And Asymmetric Frame And Analysis Of Overlapping Spectral Bands By Filter Diagonalization

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Ministerio de Asuntos Exteriores 2001HU0022

Investigador Principal: J. ORTIGOSO (ESPAÑA), V. SZALAY (HUNGRIA)

Objetivos: desarrollo de metodologia para el estudio de la interaccion

rotacion externa- rotacion interna

Periodo: 2001-2004

3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Alma: Preparación de la Explotación Científica y Contribución Técnica

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT AYA 2003-02785

Investigador Principal: JOSÉ CERNICHARO QUINTANILLA

Objetivos: Preparación de la Ciencia que se podrá realizar con el interferómetro

ALMA

Periodo: 2003-2006

Diseño y Estudio de Viabilidad de la Contribución Española (En Especie) a la Construcción del "Atacama Milimeter Array" (Alma)

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, (AYA2002-10113)

Investigador Principal: JESÚS MARTÍN-PINTADO MARTÍN

Objetivos: desarrollo tecnológico y científico en Radioastronomía

Periodo: 2003

Herschel: Contribución al Centro de Control del Instrumento Hifi y al Programa Científico

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, (ESP2002-01627)

Investigador Principal: JESÚS MARTÍN-PINTADO MARTÍN

Objetivos: desarrollo tecnológico y científico en proyectos espaciales

Periodo: 2002-2004

Herschel: Contribución al Centro de Control del Instrumento Hifi. Desarrollo Herramientas Analisis Datos de Cartografias Espectrales

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCyT, (ESP2002-12407-E)

Investigador Principal: JESÚS MARTÍN-PINTADO MARTÍN

Objetivos: desarrollo de software para el análisis de de los datos de HIFI (Herschel)

Periodo: 2004-2005

Estudio Multifrecuencia del Kpc Central de Galaxias Activas

Entidad Financiadora y Código o Referencia: AYA2002-01055. EL organismo es el MCyT bajo el Plan Nacional de Astronomía y Astrofísica.

Investigador Principal: LUIS COLINA ROBLEDO

Objetivos: Investigación básica en Astrofísica Extragaláctica

Periodo: 2003-2005

Fase B del Instrumento de Infrarrojo Medio del Jwst. Participación Iem/CSIC

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT ESP 2002-11060

Investigador Principal: LUIS COLINA ROBLEDO

Objetivos: desarrollo de la fase B del simulador criogénico del telescopio JSWT para la realización de las pruebas funcionales y de calibración del instrumento MIRI. Participación en el equipo científico europeo de MIRI.

Período: junio 2003 - junio 2005

Estudio Ab Initio Espectroscópico de Especies Moleculares de Interés Astrofísico

Entidad Financiadora y Código o Referencia AYA2002-02117, Plan Nacional I+D+I

Investigador Principal: M.L. SENENT

Periodo:2002-2005

Objetivos: Estudio ab initio espectroscópico de especies no-rígidas, radicales

hidrocarbonados y policiclos aromáticos de interés astrofísico

Espectroscopía de Moléculas No-Rígidas

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Consejo NoNaCYT de México; Proy. 37075-E.

Investigador Principal: M.VILLA

Periodo:2002-2005

Objetivos: Estudio ab initio espectroscópico de especies no-rígidas

Cálculos Mecano-Cuánticos de Moléculas de Interés Astrofísico: Preparación Científica de Herschel y ALMA

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Acción integrada HF 2003-0293 España/Francia

Investigador Principal: J. CERNICHARO (ESPAÑA), N. FEAUTRIER (FRANCIA)

Objetivos: Colaboración con los grupos de química-cuántica de Paris para obtener microscópicos de moléculas de interés astrofísico. los parámetros

Periodo: 2004-2005

Planificación de un Sistema de Computación de Alto Rendimiento para el Tratamiento de la Estructura Rotovibracional de Moléculas de Interés Astrofísico

Entidad Financiadora y Código o Referencia: AYA2002-12491E

Investigador Principal: A. NIÑO

Objetivos: Optimización métodos de computación para el cálculo de moléculas de

interés astrofísico.

Pa-Alpha Imaging Of a Sirtf-Selected Nearby Galaxy Sample

Entidad Financiadora y Código o Referencia: NASA HST-GO-9360

Investigador Principal: R. KENNICUTT

Objetivos: Observaciones e interpretación de datos del el HST

Periodo: 2002-2004

Participación Española en Miri para el James Webb Space Telescope: Fase B

Entidad Financiadora y Código o Referencia: ESP2002-11060-E

Investigador Principal: L. COLINA ROBLEDO

Objetivos: desarrollo de la participación española en el JWST

Periodo: 2003-2005

Data Analysis Of IR Emission From Active Galactic Nuclei

Entidad Financiadora y Código o Referencia: NASA ADP NNG04GC83G

Investigador Principal: M. ELITZUR

Objetivos: Interpretación de observaciones de AGNs

Periodo: 2004-2007

Star Formation in Luminous Infrared Galaxies: Giant Hii Regions And Super Star Clusters

Entidad Financiadora y Código o Referencia: NASA HST-GO-10169

Investigador Principal: A. ALONSO HERRERO Objetivos: Interpretación de observaciones de ULIRGs

Periodo: 2004-2006

In depth Study Of The Antennae With Nicmos And Acs

Entidad Financiadora y Código o Referencia: NASA HST-GO-10188

Investigador Principal: B. WHITMORE

Objetivos: Observaciones de la galaxia ANTENNAE con el HST

Periodo: 2004-2005

Estrellas Masivas en el Infrarrojo y Radio: Modelos y Observaciones

Entidad Financiadora y Código o Referencia: AYA2004-08271-C02-02

Investigador Principal: F. NAJARRO DE LA PARRA

Objetivos: Estudio de estrellas masivas en el infrarrojo y radio

Periodo: 2004-2007

The Most Massive Stars

Investigador Principal: D. FIGER

Entidad Financiadora y Código o Referencia: NASA LTSA04-0000-0008

Objetivos: Estudio de estrellas mas masivas con datos de satelites y telescopios

espaciales de la NASA,

Periodo: 2004-2007

3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Mecanismo de asociación entre ácidos nucleicos y proteinas de interés viral. Estudio por espectroscopía Raman-laser e infrarroja.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Entidad Financiadora y Código o Referencia: Ministerio de Ciencia y Tecnología (Proyecto BQU2003-01690).

Investigador Principal: P. Carmona

Objetivos: Mecanismo de ensamble de la nucleocápsida del virus HCV.

Periodo: Noviembre 2003-Noviembre 2006.

Quality seafood for improved consumer health and well-being. SEAFOODplus.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Unión Europea (VI Programa Marco), FP6-506359.

Coordinador: Torger Borrensen, Danish Institute of Fisheries Research (DIFRES) (Dinamarca).

Objetivos: mejora de la calidad del pescado para el consumidor.

Periodo: 2004-2008

Estudio teórico y experimental de la intensificación de espectros vibracionales sobre superficies (SERS y SEIR)

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MCYT. (Ref. BFM2001-2265)

Investigador Principal: J.V. García Ramos

Periodo: 28 Diciembre 2001 – 27 Diciembre 2004

Estructura y Propiedades biológicas y farmacéuticas de complejos entre metales de transición y oligopéptidos

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Ministerio de Asuntos Exteriores (Comisión Mixta Hispano-Italiana, XIX Reunión).

Investigador Principal: J.V. García Ramos (por parte española) y G. Fini (por parte italiana).

Periodo: 2002-2004

Evaluation of chemical-physical interaction mechanism between DNA and soil humic substances using infrared and Raman spectroscopy

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Ministerio de Asuntos Exteriores (Comisión Mixta Hispano-Italiana, XIX Reunión).

Investigador Principal: C. Domingo (por parte española) y C. Ciavatta (por parte italiana).

Periodo: 2002-2004

Sensores químicos basados en nanoestructuras metálicas: detección de pesticidas en alimentos por espectroscopia SERS

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Comunidad de Madrid (Ref. 07G/0042/2003).

Investigador Principal: J.V. García Ramos

Objetivos:

Periodo: 1 Octubre 2003- 30 Septiembre 2004

Superficies amplificadoras de señales vibracionales SEVS (Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy): Aplicaciones en los contaminantes hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs) y sus derivados nitrados.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CSIC-CONICYT (Chile)

Investigador Principal: J.V. García Ramos

Periodo: 2003 - 2004

Espectroscopía Raman e Infrarroja sobre superficies metálicas nanoestructuradas (SERS y SEIR) de sistemas moleculares extremadamente aislados o dispersos.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: MEC. Dirección General de Investigación. (Ref. FIS2004-00108).

Investigador Principal: J.V. García Ramos

Periodo: 2004 - 2007

"Cultural Heritage" Marie Curie Fellowships for Early Stage Training Human Resources and Mobility activities.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Unión Europea (FP6-513915)

Investigador Principal: J.V. García Ramos.

Periodo: 2004 - 2007

Dinámica no lineal en sistemas ópticos disipativos

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Ministerio de Ciencia y Tecnología (Provecto BFM2003-0427).

Investigador Principal: J. M. Soto-Crespo

Participa: José A. Sánchez Gil

Periodo: 2003-2006

Scattering of surface-plasmon polaritons by surface defects: Applications to Photon Scanning Optical Microscopy

Entidad Financiadora y Código o Referencia: US National Science Foundation, INT-0084423

Investigador Principal: A. A. Maradudin/José A. Sánchez Gil

Periodo: 2001-2004

Fotónica de interfases nanoestructuradas: detección SERS de moléculas aisladas y láseres aleatorios

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CSIC-CONACYT (ESPAÑA-

MÉXICO), 2004MX0025

Investigador Principal: José A. Sánchez Gil

Periodo: 2004-2005

Ablación y disociación con láseres: estudios fundamentales para aplicaciones tecnológicas

Entidad Financiadora y Código o Referencia: Dirección General de Investigación (MCyT) (BQU2003-08531-C02-02)

Investigador Principal: M. Martín y M. Santos. (Proyecto Coordinado)

Objetivos: Estudio de la fotoquímica implicada en los procesos de ablación y

deposición inducidos por láseres

Periodo: Noviembre de 2003 a Noviembre de 2006

Reacciones inducidas por láser en compuestos organometálicos dando lugar a materiales nanoestructurados.

Entidad Financiadora y Código o Referencia: CSIC- Subdirección general de

Relaciones Internacionales. (2003CZ0006) Investigador Principal: M. Santos y J. Pola

Objetivos: Obtención de depósitos nanoestructurados

Periodo: Enero de 2003 a Diciembre de 2004

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

Entidad Financiadora: MCYT (ref. FPA2001-2139)

Investigador Principal: T.A. Ezquerra Periodo: Diciembre 2001-Diciembre 2005

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

Entidad Financiadora: Fundación Alexander von Humboldt Stiftung

Investigador Principal español: F. J. Baltá Calleja Investigador Principal alemán: G. H. Michler

Periodo: 2001-2004

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

Referencia de la CE: G5RT-CT-2001-05026 Referencia del CSIC: GROWTH-TN/001/1391

Entidad Financiadora: CE

Investigador Principal español: T.A. Ezquerra

Periodo: 2002-2006

Structuring Polymers COST-P12

Entidad Financiadora: EC

Investigadores Principales españoles: T.A. Ezquerra, M. Gómez

Periodo: 2003-2007

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

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) (II-03-073 EC)

Investigador responsable: T.A. Ezquerra

Periodo: 01/01/2004-31/12/2006

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

Entidad Financiadora: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF). ME-964

Investigador principal: F.J. Baltá Calleja

Periodo: 2004-2006

Nanostructural control of self-assembling polymeric systems: Optimization of properties for technological applications self-assembly of high molar mass synthetic polymers for molecular recognition of biologically active molecules

Entidad Financiadora: EC, Marie Curie Reintegration Grant Program MERG-CT-

2004-505674

Investigador principal: A. Nogales Investigador responsable: T.A. Ezquerra

Periodo: Enero 2004-Abril 2005

Structural processes developed during uniaxial deformation of nano-reinforced polymer fibres: nature of the reinforcement effect of nanotubes and nanofibres

Entidad Financiadora y Código o Referencia: European Synchrotron Radiation

Facility, SC-1319

Investigador Principal: Mª Cruz García Gutiérrez

Periodo: Octubre 2003-Marzo 2004

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

Entidad Financiadora y Código o Referencia: European Synchrotron Radiation

Facility, SC-1571

Investigador Principal: Mª Cruz García Gutiérrez

Periodo: Octubre 2004-Marzo 2005

Self-assembly of high molar mass synthetic polymers for molecular recognition of

biologically active molecules

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) Hamburgo

(Alemania), I-03-003 EC

Investigador Principal: A. Nogales Periodo: Abril 2003-Diciembre 2004

Nanostructure Development in Polymer Systems: Influence of External Constraints

Entidad Financiadora: HASYLAB, Hamburgo (Alemania), Proyecto: II-04-029 EC

Investigador Principal: F.J. Baltá Calleja

Periodo: 2004-2006

Nanoestructuras auto-organizadas: Uniones túnel, puntos cuánticos magnéticos y superredes de nanocristales en superficies

Entidad Financiadora: MCYT, ref. BFM2001-0174

Investigador Principal: R. Miranda

Periodo: 2002-2004

Estudio y control estructural de sistemas autoensamblados en superficies para su aplicación como sensores

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid, ref. 07N/0023/2002

Investigador Principal: J. Álvarez

Periodo: 2003-2004

Slits: sistemas de rendijas colimadoras para haces de alta potencia. Proyecto PROFIT

Entidad Financiadora: MCYT, ref. FIT-030000-2003-135 Consultora técnica/Colaboradora: M.J. Capitán Aranda

Objetivos: Trabajo de cooperación científico-técnica con las empresas: RAMEN, S.A. y CAVAC S.R.L., para realizar proyectos de desarrollo de instrumentación científica de alta tecnología, necesario para asegurar la participación de empresas españolas en la construcción del Sincrotrón del Vallés, proyecto aprobado y previsto en un futuro próximo. Este trasvase tecnológico se concreta en participación como consultantes técnicos en el proyecto PROFIT del Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica del MCYT.

Periodo: 2003-2004

Study of self-organized systems on surface

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) (II-03-071 EC)

Investigador Principal: M.J. Capitán Periodo: Enero 2004-Diciembre 2006

Análisis de la estructura y correlación con las propiedades físicas en derivados de olefinas y cauchos

Entidad Financiadora: Repsol-YPF

Investigador Principal: J. Martínez de Salazar Bascuñana

Objetivos: Apoyo científico a diversos programas de desarrollo de productos de Repsol-YPF. Formación de TS especialistas y ayudantes de investigación

Período: Enero 2001-Diciembre 2004

Polimerización de Estireno-etileno vía catalizadores metalocénicos y otros de centro único

Entidad Financiadora: Repsol-YPF

Investigador Principal: J. Martínez de Salazar Bascuñana

Objetivos: Exploración de nuevas rutas de síntesis de copolímeros de etileno y

estireno

Periodo: Enero 2001-Diciembre2004

Nuevas Poliolefinas basadas en copolímeros de etileno

Entidad Financiadora: MCYT (MAT2002-01242)

Investigador Principal: J. Martínez de Salazar Bascuñana

Objetivos: Polimerización de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas

básicos y diseño de nuevos materiales Periodo: Marzo 2003-Marzo 2006

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

Entidad Financiadora: MEC (ref: FIS2004-01331)

Investigador Principal: F. J. Baltá Calleja Periodo: Diciembre 2004-Diciembre 2007

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

Entidad Financiadora: MEC (ref. MAT2004-05865) Investigador Principal: Mª José Capitan Aranda Periodo: Diciembre 2004-Diciembre 2007

Capítulo 4

COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES

4.1.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Encuentros Relativistas Españoles 2004

Miraflores de la Sierra (Madrid), septiembre de 2004 Conferencia

Particles and Vacuum in Perturbative and Non-Perturbative Cylindrical Gravity

J. Fernando Barbero González, <u>Guillermo A. Mena Marugán</u> y Eduardo S. Sánchez Villaseñor

XIII Encuentro de Otoño de Geometría y Física

Murcia, septiembre de 2004

Póster

Perturbative and Non-Perturbative Einstein-Rosen Waves

J. Fernando Barbero González, Guillermo A. Mena Marugán y <u>Eduardo S. Sánchez Villaseñor</u>

XIII Encuentro de Otoño de Geometría y Física

Murcia, septiembre de 2004 Minicurso Introduction to General Relativity J. Fernando Barbero González

4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

I Jornada de la Mujer en la Física

Madrid, 1 Octubre Conferencia invitada Mujeres en el Area de Física y Tecnologías Físicas del CSIC E. Moya de Guerra

Workshop "Line of Nuclear Physics for ALBA"

Barcelona, 28 y 29 Octubre 2004 Asistente M^a José García Borge

I Congreso Nacional de Astrofísica Molecular

Ciudad Real, 1-4 Diciembre 2003 Charla invitada Múltiples estados de desorden en el etanol sólido Ricardo Fernández-Perea

II Reunión De La Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN)

Puerto de la Cruz, Tenerife,20-25 de Septiembre de 2004 Comunicación oral Dependencia No Convencional con la Densidad de la Dinámica Estocástica de un Líquido Orgánico Aranzazu Maria Vidal

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

1^{as} Jornadas "El láser en la química"

13-15 Octubre 2004, Valladolid (España) Comunicación Oral Diagnóstico y cinética de plasmas fríos I. Tanarro

1^{as} Jornadas "El láser en la química"

13-15 Octubre 2004, Valladolid (España) Comunicación Oral Espectroscopía Láser de alta resolución J.L. Domenech

4.1.4 DPTO, DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Reunión Nacional de Espectroscopia XIX

Las Palmas Conferencia Invitada Espectroscopia Cuantitativa de Estrellas Masivas F. Najarro

4.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNIOCOS

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria. 4-9 Julio, 2004.

Póster.

Estudio estructural de la nucleocápsida en el virus de la hepatitis C.

Rodríguez-Casado, A.; Molina, M.; Carmona, P.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Comunicación Oral

Modelo teórico del mecanismo electromagnético en espectroscopia SERS.

V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil y J. V. García-Ramos.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Panel

Interaction of Photodynamic Antitumoral Drugs With Bovine and Human Albumins Studied By Surface-enhanced Raman Scattering (SERS) Spectroscopy

Participantes (subrayado el nombre del ponente): <u>P. Miskovsky</u>, S. Sánchez-Cortés, G. Fabriciova y J. V. García-Ramos.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Panel

Calixarenos empleados en la detección selectiva de hidrocarburos policíclicos aromáticos por espectroscopía SERS (Surface-enhanced Raman Spectroscopy).

M. Campos-Vallette, P. Leyton, J. V. García-Ramos, <u>S. Sánchez-Cortés</u>, C. Domingo y R. E. Clavijo.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Panel

Análisis no destructivo de vidrieras de la catedral de Ávila mediante espectroscopía micro-Raman *mapping* y confocal.

<u>S. Murcia-Mascarós</u>, C. Domingo, A. Muñoz Ruiz, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Panel

Estudio de la interacción de alizarina con albúmina de huevo mediante espectroscopía Raman intensificada por superficies.

M. V. Cañamares, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, 4-9 Julio.

Panel

Espectroscopía vibracional (IR y Raman) en problemas relacionados con la conservación y restauración del Patrimonio.

M. V. Cañamares, S. Murcia-Mascarós, S. Sánchez-Cortés, J. I. Millán, S. Martínez-Ramírez, C. Domingo, J. V. García-Ramos.

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Comunicación Oral.

Análisis no destructivo de vidrieras de la catedral de Ávila mediante espectroscopía micro-Raman mapping y confocal.

S. Murcia-Mascarós; C. Domingo; A. Muñoz Ruiz; S. Sánchez Cortés y J. V. García-Ramos

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Panel.

Limpieza láser del tímpano de terracota de la Portada de Los Palos de la Catedral de Sevilla.

M. Oujja; E. Rebollar; M. Castillejo; C. Domingo; F. Guerra-Librero y C. Cirujano

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Panel.

Aplicación del micro-Raman a la identificación de los polimorfos del carbonato cálcico presentes en morteros de cal

S. Martinez-Ramirez; S. Sanchez-Cortes; J.V. García-Ramos; C. Domingo; C. Fortes y M.T. Blanco-Varela

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Panel.

Estado de conservación de un conjunto de emplomados de vidrieras históricas de distinta procedencia

M. García-Heras; M. A. Villegas; J.M.A. Caen; C. Domingo y J.V. García-Ramos

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Panel.

Caracterización mediante espectroscopía electrónica y vibracional del ácido carmínico: el colorante del nuevo mundo

M.V. Cañamares, C. Domingo, J.V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

5ª Reunión de la Red Temática de Patrimonio Histórico y Cultural, CSIC

Madrid, 27 Mayo.

Panel.

Datación y caracterización de arquetas de madera decoradas: aplicación de la espectroscopía Raman a la determinación de pigmentos y soportes

M.P. Aguiló, M.V. Cañamares, J.V. García-Ramos y C. Domingo

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas (5-9 Julio 2004)

Póster

Modelo teórico del mecanismo electromagnético en espectroscopía SERS

V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil y J. V. García-Ramos.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria. 4-9 Julio, 2004.

Póster.

Estudio de la pluma de ablación del SiO mediante fluorescencia Inducida por Láser L. Díaz, M. Santos, J.A. Torresano, y M. Martin.

XIX Reunión de Espectroscopía / III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria. 4-9 Julio, 2004.

Póster.

Deposición inducida por láser de fases nanométricas de encapsulados metálicos M. Santos, L. Díaz, R. Fajgar y J. Pola.

11^a Reunión científica plenaria de Química Inorgánica. 5^a Reunión científica plenaria de Química del Estado Sólido.

Santiago de Compostela, 12-16 de Septiembre de 2004.

Comunicación.

Síntesis y estudio de las propiedades ácido-base y redox de nuevos materiales multifásicos Bi-Mo-Ti-O.

S.R.G. Carrazán, J.V. García Ramos, C. Martín, R. Mateos, y V.Rives.

4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Reunión de la Asociación Española de Usuarios de Radiación Sincrotrón – AUSE

Torremolinos, Málaga. 4-7 Febrero

Póster:

Dinámica molecular y desarrollo nano-estructural de materiales poliméricos mediante medidas simultáneas de SAXS, WAXS y espectroscopía dieléctrica A. Sanz, C. Álvarez, M.J. Capitán, M. Dommach, S.S. Funari, T.A. Ezquerra

Póster:

Estudios mediante scattering de radiación sincrotrón de procesos de deformación en materia condensada blanda: WAXS y SAXS

A. Nogales

Póster:

Microdifracción de rayos X con radiación sincrotrón aplicada a materia condensada blanda

M.C. García Gutiérrez, C. Riekel

Póster:

Desarrollo de la nanoestructura en sistemas multicapa PET/PC mediante estudios simultáneos de SAXS y WAXS

I. Puente Orench, F. Ania, F.J. Baltá Calleja

Comunicación oral en mesa de trabajo:

Necesidades y requerimientos para una línea de difracción de superficies en ALBA

M.J. Capitán

Asistencia:

A.Flores

3ª Reunión Nacional de Física del Estado Sólido

San Sebastián. 2 y 3 de Junio de 2004

Presentación oral:

Fenómenos de ordenamiento en sistemas poliméricos investigados mediante técnicas de relajación dieléctrica

T.A. Ezquerra, A. Sanz, A. Nogales

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

4.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Loop Quantum Gravity and Spinfoams

Marsella (Francia), mayo de 2004

Comunicación oral

Título de la participación: Particles in Perturbative and Non-Perturbative Cylindrical Gravity

J. Fernando Barbero González, <u>Guillermo A. Mena Marugán</u> y Eduardo S. Sánchez Villaseñor

17th International Conference on General Relativity and Gravitation

Dublín (Irlanda), julio de 2004

Comunicación oral

Título de la participación: Asymptotics of Field Commutators for Einstein-Rosen Wayes

<u>J. Fernando Barbero González</u>, Guillermo A. Mena Marugán y Eduardo S. Sánchez Villaseñor

17th International Conference on General Relativity and Gravitation

Dublín (Irlanda), julio de 2004

Comunicación oral

Título de la participación: Changes of Signature and Lorentz Violations.

J. Fernando Barbero González y Eduardo S. Sánchez Villaseñor

Aspects of Quantum Gravity

Covilha (Portugal), septiembre de 2004 2 conferencias

Título de la participación: Quantization of Einstein-Rosen Cylindrical Waves (and Micro-Causality) I y II

<u>J. Fernando Barbero González</u>, Guillermo A. Mena Marugán y Eduardo S. Sánchez Villaseñor

Aspects of Quantum Gravity

Covilha (Portugal), septiembre de 2004

2 conferencias

Título de la participación: Black Holes Analogues in Condensed Matter Systems

Título de la participación: Fluctuations in Space and in Time

Luis J. Garay Elizondo

School on Renormalization Group Methods for Interacting Electrons

Brasilia (Brasil), julio de 2004

Minicurso

Título de la participación: Wilsonian renormalization group approach for electrons near

Van Hove singularities

Participantes (subrayado el nombre del ponente): <u>José González Carmona</u>

International School on Nanotubes and Nanostructures 2004

Frascati (Italia), octubre de 2004

Conferencia

Título de la participación: Current instability and diamagnetism in small diameter

carbon nanotubes

José González Carmona

4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

International Nuclear Physics Conference, INPC-2004

Goteborg (Suecia), Junio 27 – Julio 2

Conferencia

Título de la participación: Beta-decay half-lives of waiting point nuclei from a microscopical approach

P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez, A. Escuderos, E. Moya de Guerra

International Nuclear Physics Conference, INPC-2004

Goteborg (Suecia), Junio 27 – Julio 2

Presidente de Sesión Plenaria

Título de la participación: Nuclear Physics and Society

E. Moya de Guerra

International Nuclear Physics Conference, INPC-2004

Goteborg (Suecia), Junio 27 – Julio 2

Conferencia

Título de la participación: Deformation of ⁷⁶Sr from its beta-decay E. Nácher, <u>B. Rubio</u>, ..., M.J.G. Borge, ...P. Sarriguren, O. Tengblad

International Nuclear Physics Conference, INPC-2004

Goteborg (Suecia), Junio 27 – Julio 2

Póster

Título de la participación: Two-neutrino double-beta decay within a deformed QRPA approach

<u>P. Sarriguren</u>, R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra, L. Pacearescu, A. Faessler, F. Simkovic

8th International Spring Seminar on Nuclear Physics: Key Topics in Nuclear Structure

Paestum, Italia, Mayo 23-27

Conferencia invitada

Título de la participación: Expressions for the number of pairs of a given angular momentum in the single j shell model: Ti isotopes

L. Zamick, A. Escuderos, S.J. Lee, A. Mekjian, E. Moya de Guerra, A.A. Raduta, P. Sarriguren

XXIII International Workshop on Nuclear Theory

Rila, Bulgaria, Junio 14-19

Conferencia invitada

Título de la participación: Past, present and future of A(e,e'p)B experiments

J.R. Vignote, R. Álvarez-Rodríguez, C. Fernández-Ramírez, E. Garrido, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, <u>J.M. Udías</u>

International Nuclear Physics Conference 2004

Gotemburgo, Suecia, 27 de Junio a 2 de Julio

Conferencia

Título de la participación: Are three-body resonance decays sequential or direct?

E.Garrido, A.S. Jensen, D.V. Fedorov, y H. Fynbo

European Few-Body Conference XIX

Holanda, 23 al 27 de Agosto

Conferencia invitada

Título de la participación: Three-body resonances: Spectrum of two-nucleon halo nuclei

E. Garrido

Nuclear Physics, Large and Small. Microscopic Studies of Collective Phenomena

Cocoyoc, Méjico. 19-22 Abril de 2004

Conferencia

Título de la participación: New Generalizations of the Richardson-Gaudin Models

J. Dukelsky, V. Gueorguiev y S. Pittel

International Workshop on Recent Progress and Prospects in Density-Matrix Renormalization Group

Leiden, Holanda. 2-13 de Agosto de 2004

Conferencia

Título de la participación: The Density Matrix Renormalization Group for finite Fermi

systems

J. Dukelsky

XXIII International Workshop on Nuclear Theory

Rila, Bulgaria. 14-19 Junio de 2004

Conferencia

Título de la participación: The Richardson-Gaudin integrable models

J. Dukelsky.y S. Pittel

Workshop on Spectroscopic Factors

Trento (Italia) 1-12 Marzo

Conferencia invitada y Presidente de sesión

Título de la participación: Spectroscopic factor of ³He from Faddeev calculations and Related Topics

E. Moya de Guerra, R. Alvarez Rodríguez, E. Garrido, P. Sarriguren, J.M. Udías.

Thirty years of Many-Body Physics in Spain

Peñíscola, 20-26 Septiembre

Conferencia

Título de la participación: Scaling functions beyond relativistic Fermi gas model and Superscaling

E. Moya de Guerra, A. Antonov, M. K. Gaidarov, D. N. Kadrev, M.V. Ivanov, J.M. Udías.

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Poster

Título de la participación: Asymetries in mirror transitions in the A=9 isobars.

M.J.G. Borge y Y. Prezado

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Presidente de sesión

Título de la participación: Towards Exotic Nuclei

M.J.G. Borge

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Poster

Título de la participación: Exploring Dipole polarizability in the scattering of Halo

Nuclei at Energies near the Coulomb Barrier

M.J.G. Borge, D. Escrig, et al.,

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Poster

Título de la participación: Resonance scattering of ⁹Li on protons, a tool to study ¹⁰Li

O. Tengblad y H. Jeppesen

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Poster

Título de la participación: Novel thin window design for Large Area Silicon strip detectors

O. Tengblad, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, S. Walsh

INPC-2004 International Nuclear Physics Conference

Göteborg, Suecia 26 junio – 2 julio

Poster

Título de la participación: Towards a modular detector telescope for low-energy charged particles

O. Tengblad, M. Madurga, G. Nyman, R. Schneider

International conference on diffusion materials, DIMAT 2004

Cracovia (Polonia), 18-23 julio

Comunicacion

Título de la participación: DifEfIsol: A diffusion-effusion database for the optimization of radioactive ion beams.

M. Turrión, O. Tengblad, L.M. Fraile

ENAM04

Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, September 12-16

Poster

Título de la participación: TARGISOL: an ISOL-database on the web

O. Tengblad, M. Turrion, LM Fraile

ENAM04

Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, September 12-16

Conferencia

Título de la participación: New Structure information on ³⁰Mg, ³¹Mg and ³²Mg

H. Mach, L.M. Fraile, O. Tengblad, R. Boutami et al.

ENAM04

Callaway Gardens, Pine Mountain, Georgia, USA, September 12-16 Título de la participación: Recent highlights from ISOLDE @ CERN L.M. Fraile

Workshop on Dynamics of Viscous Liquids

Munich, Marzo 2004

Conferencia Invitada

Título de la participación: Muon Spin Relaxation as a tool for the investgation of glassy dynamics

F. J. Bermejo

12th International Conference on Liquid and Amorphous Metals (LAM 12)

Metz, Julio 2004

Conferencia Invitada

Título de la participación: Anomalies in the dynamics of molten transition metals

F. J. Bermejo

II International Conference on Quantum Crystals and Cryocrystals

Wroclaw (Polonia), Agosto 2004

Conferencia Invitada

Título de la participación: Orientationally disordered crystals as benchmark models to

study low temperature anomalies in glasses

F. J. Bermejo

Visualization, Imaging, and Image Processing-VIIIP 2004

Marbella (España), 6 Agosto 2004

Presentación oral (Charla)

Título de la participación: A Multiresolution Binning Algorithm to Analyse neutron Spectroscopy Data

Specifoscopy Data

Ibon Bustinduy, F. J. Bermejo, German Bordel.

N2M2, Neutrons and Numerical Methods

ILL-Grenoble (Francia), 15-18 Septiembre 2004

Póster

Título de la participación: Visual aids to explore Single Crystal Magnetic Excitations <u>Ibon Bustinduy</u>, F. J. Bermejo, German Bordel.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

XIX Reunión Nacional de Espectroscopía – III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, España, 4 – 9 Julio 2004

Póster

Título de la participación: Spectrometric diagnostics and kinetic modeling of low pressure plasmas of air

M. Castillo, I. Méndez, A. Islyaikin, V. J. Herrero, I. Tanarro

XIX Reunión Nacional de Espectroscopía – III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, España, 4 – 9 Julio 2004

Póster

Título de la participación: Translational energy spectrum of the ions reaching the cathode in DC discharges of hydrogen

A. M. Islyaikin, V. J. Herrero, I. Tanarro, F. L. Tabarés, D. Tafalla

XIX Reunión Nacional de Espectroscopía – III Congreso Ibérico de Espectroscopía

Las Palmas de Gran Canaria, España, 4 – 9 Julio 2004

Comunicación oral

Estudio espectroscópico del hexahidrato cristalino de HCl

I. K. Ortega, B. Maté, M. A. Moreno, D. Fernández, R. Escribano, V. J. Herrero

Mismo congreso:

Póster, Cálculo del espectro infrarrojo de cristales de ácido nítrico puro y monohidratado,

D. Fernández, R. Escribano, V.J. Herrero, B. Maté, M.A. Moreno e I.K. Ortega

Mismo congreso:

Póster, Investigación de efectos de orientación en capas de trihidrato de ácido nítrico, B. Maté, I.K. Ortega, M.A. Moreno, R. Escribano, D. Fernández y V.J. Herrero

Mismo congreso:

Conferencia invitada: Estudios espectroscópicos de hielos de interés atmosférico B. Maté

17th Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG)

Constanta, Rumanía, 1-5 Septiembre, 2004

Póster

Título: Cold Air Plasmas: Neutral and Ion Kinetics.

M. Castillo, I. Méndez, A. M. Islyaikin, V. J. Herrero, I. Tanarro

17th Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases (ESCAMPIG)

Constanta, Rumanía, 1-5 Septiembre, 2004

Póster

Título de la participación: Energy and mass distributions of ions at the cathode of DC discharges of H₂ and H₂/CH₄/N₂ mixtures.

A. M. Islyaikin, V. J. Herrero, I. Tanarro, F. L. Tabarés and D. Tafalla

2nd Recetox Worshop (Ice and Snow: Contamination, interactions and (photo)chemistry)

Brno, República Checa, 4-7 noviembre 2004

Comunicación oral

Título de la participación: "Ices" of HNO₃ and HCl hydrates. IR spectroscopy and theoretical calcularions.

V. J. Herrero

Molecules Trapped in Solids, Summer School

Dijon (France); 13-17 Septiembre

Póster

Título de la participación: RAIRS Study of the Adsorption of HCl on NAT Films

I. K. Ortega, B. Maté, M. A. Moreno, V. J. Herrero

International Conference on Raman Spectroscopy

8-13 agosto, Goald COSAT, Australia

Póster

Título de la participación: Double resonance raman-raman spectroscopy. a new high resolution technique for studying vibrationally excited molecular states

D. Bermejo

European Conference on Molecular Spectroscopy

Póster

Título de la participación: High resolution raman spectra of $^{12}c_2h_4$: the v_2 and v_3 fundamentals and the $^2v_{10}$ overtone band.

<u>D. Bermejo</u>, R. Escribano, J.L. Doménech, R. Z. Martínez, E. Canè, L. Fusina y G. DiLonardo.

The 18th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy

Praga (República de Chequia), 8-12 Septiembre 2004

Póster

Título de la participación: High resolution spectroscopy of the v_1 region and Raman-Raman double resonance of the $2v_1$ - v_1 band of $^{32}SF_6$ and $^{34}SF_6$. Determination of the equilibrium bond length of sulfur hexafluoride.

V. Boudon, J.L. Doménech, D. Bermejo, H. Willner

59th OSU Internatinal Symposium on Molecular Spectroscopy

Columbus (Ohio, EEUU) 21-25 Junio 2004

Comunicación oral

Título de la participación: High resolution spectroscopy of the v_1 region and Raman-Raman double resonance of the $2v_1$ - v_1 band of $^{32}SF_6$ and $^{34}SF_6$. Determination of the equilibrium bond length of sulfur hexafluoride.

V. Boudon, J.L. Doménech, D. Bermejo, H. Willner

International Symposium on Quantum Fluids and Solids

Trento (Italia), 5-9 julio 2004

Póster

Título de la participación: Structure, Superfluidity and Raman Spectroscopy of Small para-Hydrogen Clusters

D. Blume, J.M. Fernández, S. Montero, K. Nho, G. Tejeda, and J.P. Toennies

5th International Conference on Cryocrystals and Quantum Crystals

Wroclaw (Polonia), 29 agosto – 4 septiembre 2004

Conferencia plenaria

Título de la participación: "Watching the birth of a hydrogen droplet"

S. Montero

Reduced Workshop Paris-Madrid on Quantum Chemistry and Astrophysics

Madrid, 21-22 octubre 2004

Conferencia

Título de la participación: Molecular Jets: Astrophysical Applications

S. Montero

HERSCHEL Preparatory Science Workshop

Leiden (Holanda), 14-17 diciembre 2004

Conferencia

Título de la participación: State-to-state Collisional Rates from Laboratory Experiments

S. Montero

4.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Herschel Science Team

Caltech, Pasadera, CA, 24-30 de enero

Ponencia

Título de la participación: Preparación Científica de Herschel

J. Cernicharo

Dense Gas around protostars

Zwolle (Holanda), 16-20 de febrero

Conferencia Invitada

Título de la participación: Molecular line surveys around protostars: a statistical

approach to the determination of physical and chemical conditions

J. Cernicharo

Radiative transfer modeling of water

Leiden (Holanda), 21-24 de marzo Organizador J. Cernicharo

Radiative transfer modeling of water

Leiden (Holanda), 21-24 de marzo Asistencia J. Rodríguez Goicoechea

Exploring the Cosmic Frontier

Berlin (Alemania) 17-21 de mayo Conferencia Invitada

Título de la participación: Millimeter, submillimete and far-IR Astronomical Facilities J. Cernicharo

Workshop de transferencia radiativa sobre Herschel

Observatorio de Meudon, Paris (Francia), 26-30 de abril Conferencia Invitada Título de la participación: Radiative Transfert in evolved stars. The case of water vapour J. Cernicharo

Review panel del satelite ISO de la ESA

Villafranca, Madrid, 14-15 de junio Member of the Board J. Cernicharo

COSPAR

Paris (Francia) del 22 al 25 de julio Conferencia invitada Título de la participación: Far-IR Spectroscopy from Space J. Cernicharo

The Cool Universe: Observing Cosmic Dawn

Valparaiso (Chile) 4-8 Octubre 2004 Conferencia Invitada Título de la participación: Astrochemistry J. Cernicharo

ESPA20004

Valladolid, España, septiembre

Poster

Título de la participación: Carbonated chains

H. Massó, M.L. Senent, J. Goicoechea y J. Cernicharo

ESPA20004

Valladolid, España, septiembre

Poster

Título de la participación: The roto-torsional spectrum of methyl format

R. Domínguez-Gómez, M.L. Senent, M. Villa v F.J. Meléndez

3ª Reunion Mexicana de Fisicoquímica Teórica

Puebla, Mexico

Poster

Título de la participación: Espectro roto-vibracional del etano

R. Hidalgo, M. Villa, M.L. Senent

PCMI

Paris (Francia), 13-14 de septiembre

Conferencia Invitada

Título de la participación: Molecular Spectroscopy from Space. Tools and and futur

instruments.

J. Cernicharo

Workshop COSMIC visión de la ESA

Paris (Francia), 15-16 de septiembre

Miembro del SOC

J. Cernicharo

The Dusty and Molecular Universe. A prelude to Herschel and ALMA

Paris (Francia), 26-29 de octubre

Poster

Título de la participación: Chemical Complexity in the nucleus of NGC253

Jesus Martín-Pintado

The Dusty and Molecular Universe. A prelude to Herschel and ALMA

Paris (Francia), 26-29 de octubre

Conferencia

Título de la participación: Diagnostics in the far-IR: from OH to carbon chains

J. Rodríguez Goicoechea

Workshop Herschel Preparatory Science

Leiden (Holanda), 12-17 de diciembre

Conferencia y Organizador

Título de la participación: Spectral line surveys. Tools and futur developements

J. Cernicharo

Workshop Herschel Preparatory Science

Leiden (Holanda), 14-18 de diciembre

Conferencia

Título de la participación: Tests of accuracy of a 2D potencial surface: SO(X³S⁻)He(¹S)

M.L. Senent y A. Spielfiedel

Workshop Herschel Preparatory Science

Leiden (Holanda), 12-17 de diciembre

Asistencia

Marcelino Agúndez

Workshop Herschel Preparatory Science

Leiden (Holanda), 12-17 de diciembre

Conferencia

Título de la participación: OH/H2O in the galactic center and in orion: related species

Javier Rodríguez Goicoechea

Workshop Herschel Preparatory Science

Leiden (Holanda), 12-17 de diciembre

Asistencia

Izaskun Jiménez

The Dusty and Molecular Universe. A prelude to Herschel and ALMA

Paris (Francia), 26-29 de octubre

Conferencia Invitada y miembro del SOC

Título de la participación: Spectral line surveys

J. Cernicharo

The Dusty and Molecular Universe. A prelude to Herschel and ALMA

Paris (Francia), 26-29 de octubre

Poster

Título de la participación: The shock precursor in L1448 outflow

Izaskun Jiménez

8th European Conference on Atomic and Molecular Physics

Rennes (France) July 2004

Póster

Título de la participación: Quantal and Semiclassical study of electron capture reactions in N^{+2} + H collisions.

P. Barragán, L. F. Errea, A. Macías, L. Méndez, I. Rabadán and A. Riera.

8th European Conference on Atomic and Molecular Physics

Rennes (France) July 2004

Póster

Título de la participación: Study of the collisions $H^+ + H_2$ at low impact energies with vibronical resolution.

L.F. Errea, L. Fernández, A. Macías, L. Méndez, B. Pons, I. Rabadán and A. Riera.

8th European Conference on Atomic and Molecular Physics

Rennes (France) July 2004

Póster

Título de la participación: Sign-consistent dynamical couplings between ab initio three-center wavefunctions.

L. F. Errea, L. Fernández, A. Macías, L. Méndez, I. Rabadán and A. Riera.

12th Internacional Conference on the Physics of Highly Charged Ions

Vilnius (Lithuania) September 2004

Póster

Título de la participación: Charge transfer in H2+ + H collisions.

L. F. Errea, A. Macías, L. Méndez, I. Rabadán, and A. Riera.

Molecular Spectroscopy Symposium

Columbus, Ohio (USA), 21-25 de junio

Comunicación

Título de la participación: Ethane symmetric streching vibrational normal modes

M. Villa, M.L. Senent y R. Hidalgo

Molecular Spectroscopy Symposium

Columbus, Ohio (USA), 21-25 de junio

Comunicación

Título de la participación: The roto-torsional spectrum of glycoaldehyde

M.L. Senent, M. Villa, R. Domínguez-Gomez y H. Masso

Workshop on Critical Evaluation of mm-/submm-wave Spectroscopic Data for Atmospheric Observations

Mito, Ibaraki, Japón, enero

Conferencia invitada

Atmospheric continuum-like absorption evaluation from accurate ground-based FTS measurements in the 1000-200 microns range

J.R. Pardo, E. Serabyn, M. C: Wiedner

Molecular Spectroscopy Symposium

Columbus, Ohio (USA), 21-25 de junio

Comunicación

Título de la participación: The Millimeter Spectrum of CRL618 and Related Studies on

Physical Conditions

J.R. Pardo, J. Cernicharo, J. R. Goicoechea

Workshop: Benchmarking PDR models

Univ. Leiden, Holanda, 2-8 de abril Asistencia J. R. Goicoechea

Conferencia Astronomia subm./IR/Visible

Atelier, Greta, 26-30 de abril

Conferencia invitada

Título de la participación: Atmospheric Radiative Transfer

J.R. Pardo

Towards large submillimetre dishes: science drivers and technical challenges

Edimburgo 20-24 de octubre

Conferencia invitada

Título de la participación: Atmospheric effects in the submillimeter: Recent

developments and open problems

J.R. Pardo

Herschel Calibration Workshop

Leiden 1-3 de diciembre

Conferencia invitada

Título de la participación: Broadband submillimeter measurements of planetary

brightness temperatures

J.R. Pardo

II Internacional workhop of science with the GTC

Mexico, 13-19 de febrero

Poster

Título de la participación: AGN activity and circumnuclear star foration in nearby galaxies

Alonso-Herrero, A.; Díaz-Santos, T.; Colina L.; Ryder, S.; Knapen, J.

II Internacional workhop of science with the GTC

Mexico, 13-19 de febrero

Conferencia de revisión

Título de la participación: Star formation in the nuclear regions of galaxias:multifrequency studies with GTC

L Colina

II Internacional workhop of science with the GTC

Mexico, 13-19 de febrero

Poster

Título de la participación: AGN Activity and circummuclear star formation in nearby galaxies

Tanio Díaz Santos

II Internacional workhop of science with the GTC

Mexico, 13-19 de febrero

Asistencia

Macarena Garcia

Starburst - From 30 Doradus to Lyman break galaxies

Cambridge, Reino Unido, septiembre

Conferencia

Título de la participación: Kinematics and dynamical mass estimates in low-z ULIRGs

L. Colina

Starburst – From 30 Doradus to Lyman break galaxies

Cambridge, Reino Unido, septiembre

Charla invitada

Título de la participación: Near-infrared super star clusters in starburst and luminous

infrared galaxies

Alonso-Herrero A.

Starburst – From 30 Doradus to Lyman break galaxies

Cambridge, Reino Unido, septiembre

Poster

Título de la participación: Integral field spectroscopy and HST imaging of ULIRGs at

low and high redshift: IRAS 16007+3743

Macarena Garcia

Evidence for Tori&Winds in AGN

13-16 Sept, Univ. Leicester,

Poster

Título de la participación: Mid-infrared observations of seyfert galaxias: Can we

constrain the torus and AGN properties?

Alonso-herrero, A.

Planets to Cosmology, essential science in Hubble's final years

Baltimore, M.D., 3-6 de mayo

Poster

Título de la participación: Integral field spectroscopy and HST imaging of ULIRG's.

Preliminary results of iRAS 16007+3743

Macarena Garcia

Massive Galaxias over cosmic time

Baltimore M.D., 27-29 de septiembre

Poster

Título de la participación: Kinematics of low-z ULIRGs and implications for dynamical

mass derivations in high-z galaxies

Macarena Garcia

SPIE Conference on Optical, Infrared and Millimeter Space Telescopes

Glasgow, Reino Unido, junio

Poster

Título de la participación: The MIRI cold telescope simulator

L. Colina

The Many Scales in the Universe

Granada, España, 13-17 de septiembre

Póster

A Multi-Wavelength view of star clusters in the circumnuclear ringo f NGC7469

Participantes (subrayado el nombre del ponente): <u>Tanio Díaz Santos</u>

JENAN 2004

Granada, España, Septiembre

Conferencia Invitada

Título de la participación: Massive Stara in the galatic center

F. Najarro

The Fate of the Most Massive Stars

Wyoming, USA, Mayo

Conferencia Invitada

Título de la participación: The Pistol Star and instable massive Stara at the galactic center

F. Najarro

4.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

The first seafoodplus conference. Progress meeting consumer products

Copenhague (Dinamarca). 4-8 Octubre, 2004.

Conferencia invitada.

Título de la participación: Interactions between the seafood matrix and dietary fibres in restructured seafood products.

Carmona, P.; Sánchez, I.; Careche, M.

XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy

Kraków, (Polonia). 5-10 Septiembre 2004.

Póster

Presentación del trabajo: Synthesis, structural and conformational study of some amides derived from N-methylpiperazine.

I.. Iriepa, A. I. Madrid, E. Gálvez y J. Bellanato

XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy.

Cracovia (Polonia), 5-10 Septiembre.

Conferencia Plenaria

Título de la participación: Vibrational Spectroscopy on Metallic Nanostructures (SERS and SEIR): New Substrates and Applications.

<u>J. V. García-Ramos</u>, S. Sánchez-Cortés, M. V. Cañamares, J. A. Sánchez-Gil y C. Domingo.

XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy.

Cracovia (Polonia), 5-10 Septiembre.

Póster

Título de la participación: SERS and SEIRA Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) on Calix[4]arene-Functionalized Silver Nanoparticles.

<u>C. Domingo</u>, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, P. Leyton, M. Campos-Vallette, C. Saitz ay R. E. Clavijo.

Raman and Infrared Spectroscopy of Biological Molecules, RISBM 2004 (International Bunsen Discussion Meeting)

Jena, Alemania, 1-2 Marzo.

Póster

Título de la participación: Confocal Micro-Raman Study of Chromosomes.

J.V. García-Ramos, G. Morcillo and S. Sánchez-Cortés.

Raman and Infrared Spectroscopy of Biological Molecules, RISBM 2004 (International Bunsen Discussion Meeting)

Jena, Alemania, 1-2 Marzo.

Póster

Título de la participación: Surface-enhanced Raman Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.

P. Leyton B., M. Campos-Vallette, R. E. Clavijo, C. Saitz, S. Sánchez-Cortes, C. Domingo, J. V. García-Ramos.

Raman and Infrared Spectroscopy of Biological Molecules, RISBM 2004 (International Bunsen Discussion Meeting)

Jena, Alemania, 1-2 Marzo.

Póster

Título de la participación: Polyamine Pt(II) Chelates with Potential Anticancer Properties: a Vibrational Spectroscopy Study.

M. P. M. Marques, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, L. A. E. Batista de Carvalho.

First NanoSpain Workshop

San Sebastián, 10-12 Marzo.

Póster

Título de la participación: Raman and Infrared Spectroscopy on Nanostructured Metal Surfaces (SERS and SEIR) of extremely dispersed or isolated molecular systems

M.V. Cañamares, C. Domingo, J.A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés and <u>J.V. García-</u>Ramos

First NanoSpain Workshop

San Sebastián, 10-12 Marzo.

Póster

Título de la participación: Effect of increasing curvature in the electronic structure of carbon nanotubes: In situ UV-photoemission spectroscopy study

<u>T. de los Arcos</u>, M. G. Garnier, J. W. Seo, L. Forró, P. Oelhafen, C. Domingo, J. V. García Ramos, and S. Sánchez Cortes

34th International Symposium of Archaeometry

Zaragoza, 3-7 Mayo

Póster

Título de la participación: Mapping and Confocal MicroRaman Spectroscopy: non-invasive analysis of weathered stained glass windows

S. Murcia-Mascarós, C. Domingo, A. Muñoz Ruiz, S. Sánchez Cortés and J. V. García-Ramos

International Conference on Photo-Excited Processes and Applications, 4-ICPEPA

Lecce, Italia, 5-9 Septiembre.

Póster

Título de la participación: Influence of polymer molecular weight on the UV ablation of doped poly(methyl methacrylate)

E. Rebollar, G. Bounos, M. Oujja, C. Domingo, S. Georgiou and M. Castillejo

International COST G7 Workshop

Gdansk, Polonia, Octubre.

Póster

Título de la participación: Laser restoration of terracotta of the portal of Palos in Seville Cathedral

M. Oujja, E. Rebollar, M. Castillejo, C. Domingo, F. Guerra –Librero, C. Cirujano

1st NANOSPAIN Workshop

San Sebastián, 10-12 marzo 2004

Póster

Título de la participación: Surface plasmon photonics on nanostructured metal surfaces Participantes (subrayado el nombre del ponente): J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, E. R. Méndez y A. A. Maradudin.

PROGRESS IN ELECTROMAGNETICS RESEARCH Symposium (PIERS 2004)

Pisa (Italia), 28-31 marzo 2004

Conferencia

Título de la participación: Light scattering from disordered nanostructured metal surfaces: Localized SPP and SERS EM mechanism

J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, y E. R. Méndez

PROGRESS IN ELECTROMAGNETICS RESEARCH Symposium (PIERS 2004)

Pisa (Italia), 28-31 marzo 2004

Conferencia

Título de la participación: CW and pulsed SPP scattering by defects on metal surfaces: Applications in Nano-Optics

J. A. Sánchez-Gil, y A. A. Maradudin

Progress in electromagnetics research Symposium (Piers 2004)

Pisa (Italia), 28-31 marzo 2004

Conferencia

Título de la participación: An impedance boundary condition for a 2D randomly rough surface that is satisfied on a planar surface

A. A. Maradudin y J. A. Sánchez-Gil

4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Reunión de la Red Temática Europea 'Carbon-Nanotubes' CNT

Budapest (Hungría), 23-26 Marzo 2004.

Conferencia

Low percolation threshold in Nanocomposites based on oxidized SWCNT and PBT

T.A. Ezquerra

Reunión de la Red Temática Europea 'Carbon-Nanotubes' CNT

Szczecin (Polonia), 6-9 Octubre 2004

Conferencia

Anisotropic crystallization in poly(butylene terephthalate) induced by oriented carbon nanotubes

T.A. Ezquerra

Reunión del Comité Evaluador de propuestas "Soft Condensed Matter and Biological Materials" del 'European Synchrotron Radiation Facility' (ESRF)

Grenoble, 21-23 Abril; 24-26 Octubre; Participación en el Comité Evaluador T.A. Ezquerra

9th Microsymposium: Crystallization Processes and Micromechanical Effects in Confined Polymer Systems

Lutherstadt Wittenberg (Alemania), 6-7 Mayo 2004

Presidente de Sesión y Conferencia Invitada:

Nanostructure development in multilayered polymer systems as revealed by X-ray scattering methods

F.J. Baltá Calleja, I. Puente, F. Ania

Conferencia Invitada

Influence of the filler structure on the micromechanical properties of polymer nanocomposites

A. Flores, F.J. Baltá Calleja

Póster

Structure-property correlations in multicomponent polyethyelenes R. Adhikari, R. Godehardt, W. Lebek, G.H. Michler, S. Frangov, H.-J. Radusch, F.J. Baltá Calleja

Scientific Advisory Committee (FBS) HASYLAB-DESY

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 14 Mayo 2004. Asistencia como Vocal del Comité Científico: F.J. Baltá Calleja

Research Project Review Panels (PRP) HASYLAB-DESY

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 14 y 15 Mayo 2004; 8 Noviembre 2004 Asistencia a la Comisión de Evaluación: F.J. Baltá Calleja

3rd East-Asian Polymer Conference (EAPC-3)

Chengdu (China), 6-9 Junio 2004

Presidente de Sesión y Conferencia Invitada

Recent Advances in Micromechanical Properties of Polymers Relating to Nanostructure F.J. Baltá Calleja

International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)-World Polymer Congress (WPC) MACRO 2004. 40th International Symposium on Macromolecules

Paris (Francia), 4-9 Julio 2004

Presidente de Sesión y Conferencia Invitada

Advances in micromechanical properties of polymers relating to nanostructure: microindentation studies

F.J. Baltá Calleja

The 15th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships & Molecular Modelling.

Istambul (Turkey), 05-10 September 2004.

Póster

Structure-Activity relationships revealed by 3D-QSAR for metallocene based olefin polymerization catalysts

V. Cruz, J. Ramos, S. Martínez, A. Muñoz-Escalona, J. Martínez-Salazar

Reunión "Synchrotron Workshop. X-ray Microscopy: Present and Future

Barcelona, 24 Septiembre 2004

Asistencia: T. Ezquerra

11. International Conference Polymeric Materials 2004

Halle/Saale (Alemania), 29 Septiembre-1 Octubre 2004

Presidente de Sesión: F.J. Baltá Calleja

Conferencia Plenaria

Micromechanical properties of polymers and blends relating to nanostructure and morphology

F.J. Baltá Calleja

Conferencia

Nanostructure development in amorphous oriented polymers upon annealing as revealed by microindentation hardness

Araceli Flores, F.J. Baltá Calleja

Conferencia

Structure formation and micromechanical properties of polymer multilayered systems Inés Puente Orench, Fernando Ania, Norbert Stribeck, F.J. Baltá Calleja

First Workshop: COST P12 Structuring of Polymers

Bacoli, Nápoles (Italia), 27-30 Octubre 2004

Póster

Structure-dynamics relationships in PBI as revealed by simultaneous SAXS, WAXS and dielectric spectroscopy

A. Sanz, A. Nogales, N. Lotti, M. Dommach, S.S. Funari, T.A. Ezquerra

Presentación Oral

Cold crystallization processes in glassy polymers as revealed by microindentation hardness

Araceli Flores, F.J. Baltá Calleja

Póster

Metallocene Based Ethylene/Styrene Copolymers. Computer Modelling, Thermal and Mechanical Properties

M.T. Expósito, N. Haider, A. Muñoz-Escalona, <u>J. Ramos</u>, L. Méndez, S. Martínez, V. Cruz, J. Martínez-Salazar

Póster

Molecular weight and entanglement network in linear polyethylene J.F. Vega; M. Aguilar, J. Martínez-Salazar

Workshop Non Crystalline Diffraction with Microfocus for Life and Materials Science on ALBA

Barcelona, 28 y 29 Octubre 2004

Sesión del Comité Ejecutivo

Technical discussion on the Non Crystalline Diffraction with Microfocus beamline: Energy range, Optics, Detectors, Applications, Scientific Case, Strategies

Organizadores: T. Ezquerra, O. López, A. Nogales

Ponente

Presentation of the actual pre-proposal

M.C. García Gutiérrez

Workshop A Difracction Beamline for Nanostructures, Thin films, Surfaces and Interfaces on ALBA

Madrid, 3 y 4 Noviembre 2004 Organizador y ponente M.J. Capitán

Meeting of the Photon Science Committee (PSC)

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 8 Noviembre 2004.

Asistencia como Vocal del Comité Científico: F.J. Baltá Calleja

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

4.3.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Alejandro Corichi Instituto de Ciencias, Nucleares, UNAM, México 28 abril-2 mayo de 2004

Jorge Pullin Louisiana State University, Estados Unidos 3-6 julio de 2004

4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

J.A. Caballero Universidad de Sevilla Julio 12-16

M. Gaidarov NAS, Bulgaria 18-30 Octubre

Aksel S. Jensen Universidad de Aarhus, Dinamarca 11 al 15 de Octubre

G. Strattan IJNR, Rumania 27-30 Marzo

V. Vento Univ. Valencia 10-15 Junio

F. Fernández Universidad de Salamanca 27 al 30 de Octubre

S. Rombouts Universidad de Gante, Bélgica. 8-10 Marzo de 2004

S. Dimitrova Academia de Ciencias de Bulgaria. 14-27 de Marzo de 2004

J. M. Arias Universidad de Sevilla. 14-16 Abril de 2004 G. G. DusselUniversidad de Buenos Aires, Argentina.30 de Septiembre a 12 de Octubre de 2004

G. OrtizLaboratorio Nacional de LosAlamos, USA.17-24 Octubre de 2005

P. Van Isacker GANIL, Francia. 11-17 Diciembre de 2004

Ángel Miguel Sánchez Universidad de Huelva 15-19 de junio

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Philipp Zielke Universidad de Göttingen, Alemania 5-24 octubre 2004

Dr. Viktor Szalay Academy of Sciences. Hungria 4-15 octubre 2004, 8-19 noviembre

4.3.4 DPTO, DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Maria Villa Villa UAM, Mejico D.F. 2-15 de septiembre

Francisco Melendez Bustamante Universidad de Puebla, Mejico 28-30 de septiembre

François Lique Observatorio de Meudon, París, Francia 1- 30 noviembre

Fabien Daniel Observatorio de Meudon, París, Francia 3-10 Junio, 14 – 20 Abril

Moshe Elitzur University of Kentucky, EEUU 2 semanas

Chris Packham Universidad de Florida, Gainesville, USA

febrero 3 días

Santiago Arribas Space Telescope Science Institute, Baltimore, USA Junio y octubre (1 semana)

Ana Monreal Instituto de Astrofísica de Canarias Enero, marzo y junio (10 días)

Bertrand Lefloch Observatorio de Grenoble (Francia) Junio y octubre (1 semana)

Nuria Marcelino IRAM (España) Marzo, junio, octubre, diciembre (1 semana)

Artemio Herrero IAC , Granada(España) 1-10 junio

4.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Marcelo Campos Vallette Universidad de Chile. Santiago. Chile. Agosto de 2004

Giancarlo Fini Universidad de Bolonia. Italia Mayo de 2004

Tamara Leskova Department of Physics & Astronomy, University of California, Irvine (USA) 9-20 Julio 2004

Elena Chaikina Departamento de Óptica, División de Física Aplicada (CICESE), Ensenada (México) 9-20 Julio 2004

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Sven Henning Martin-Luther-Universität, Halle (Alemania). 8-21 Julio 2004; 16-31 Octubre 2004

Rameshwar Adhikari Martin-Luther-Universität, Halle (Alemania). 15-21 Julio 2004 Said Bouhelal Université Ferhat Abbas, Sétif (Argelia) 12-24 Octubre 2004

4.4 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO (>1 MES)

4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

A.N. Antonov NAS, Bulgaria Enero - Abril

V. GueorguievAcademia de Ciencias de Bulgaria.1 de Enero a 30 de Junio de 2004

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Annedore Punge Universidad de Würtzburg, Alemania 24 marzo a 24 julio 2004

4.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Patricio Leyton Universidad de Chile. Santiago. Chile. Octubre 2003- Marzo 2004

Giampietro Corrado Universidad de Bolonia. Italia Octubre 2003- Marzo 2004

Pavol Miskovsky Safarik University of Kosice (Eslovaquia). Mayo 2004 – Agosto 2004

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Manfred Pilkuhn Stuttgart University (Alemania) 29 Septiembre 2003 – 30 Septiembre 2004 Sabático

Rudiger K. Bayer Universität GH Kassel (Alemania) 13 Octubre 2004 – 12 Octubre 2005 Sabático

4.5 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

4.5.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Alejandro Corichi

Agujeros Negros en Gravedad Cuántica de Lazos Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, México 29 de abril de 2004

Jorge Pullin

Gravedad Cuántica Discreta Consistente Louisiana State University, Estados Unidos 5 de julio de 2004

Francisco Guinea

Supresión de efectos cuánticos y decoherencia inducida por contactos metálicos Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC 22 de abril de 2004

4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

A.N. Antonov Elastic and Quasielastic Scattering NAS, Bulgaria 23 Abril

G. Strattan

Genesis and Evolution of Law of Nature: Galilei, Kepler and Descartes Universidad Babes-Bolyai, Rumania 29 Marzo

V. Vento

Pentaquark Physics Universidad de Valencia 11 Junio

J. M. Arias

Transiciones de fase cuánticas en núcleos y el modelo de bosones en interacción Universidad de Sevilla
15 Abril de 2004

G. G. Dussel

Modelos bosónicos con interacciones repulsivas. Universidad de Buenos Aires 7 Octubre de 2004

4.5.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Andreas Taubert

Smart Materials From Peptides, Proteins and Inorganics.

Department of Chemistry. University of Basel. Suiza.

21 de Junio.

Pavol Miskovsky

Photodynamic Therapy of Cancer in the Light of New Molecular Knowledge: Application of Fluorescence Techniques and Molecular Moddeling to the Study of Inhibition of Protein Kinase C by Hypericin and its Influence on Apoptosis in U-87 MG Human Malignant Glioma Cells

Safarik University. Kosice. Eslovaquia

24 de Junio.

Marco Leona.

A closer look at art: Scientific Research in an Art Museum

Department of Scientific Research. The Metropolitan Museum of Art, New York. USA. 20 de Septiembre.

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

M.H. Pilkuhn

Oligothiophenes and Self-Assembly-Monolayers: Material Studies for Molecular Electronics

Physics Institute, Stuttgart University (Alemania)

12 Febrero 2004

Fernando Flores Sintas

Formación de barreras en las interfaces de materials orgánicos

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada de la Universidad Autónoma de Madrid.

12 Marzo 2004

Said Bouhelal

Crosslinking of iPP in presence of peroxide/sulfur couple

Engineering Faculty, Université Ferhat Abbas, Sétif (Argelia)

20 Octubre 2004

4.6 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS NACIONALES (> 1 SEMANA)

4.6.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Diego Escrig Forano Facultad de Física (U. Sevilla) 30 agosto- 17 diciembre 2004

4.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Isabel Tanarro y Víctor J. Herrero

División de Fusión, CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas), Madrid, visitas frecuentes.

4.6.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo

Telescopio 30m Pico Veleta Granada 31 de agosto-6 de septiembre

M.L. Senent

Escuela Universitaria de Informática de la UCLM, Ciudad Real, 22-28 de Noviembre

L. Colina

Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial, INTA, Madrid, Todo el año (4 días por mes)

Juan Ramón Pardo Telescopio 30m Pico Veleta, Granada 31 de agosto-6 de septiembre

Francisco Najarro de la Parra EMIR, IAC Tenerife Julio

Francisco Najarro de la Parra EMIR, IAC, Tenerife 10-17 de Noviembre

Izaskun Jiménez Telescopio 30m Pico Veleta, Granada 15-22 de julio

Belén Tercero Telescopio 30m Pico Veleta, Granada 31 de agosto-6 de septiembre

4.6.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Araceli Flores

Universidad Complutense de Madrid

Septiembre.

Miembro Tribunal de tesis doctoral: "Estudio de transformaciones estructurales en polímeros mediante susceptibilidad diamagnética: transiciones de fase y fenómenos de reorientación", M.C. El Fadel.

4.7 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES (>1 SEMANA)

4.7.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor

Center for Gravitational Physics and Geometry, Penn State University, E.E.U.U. 19 de abril al 11 de mayo de 2004

Luis J. Garay Elizondo Universidade da Beira Interior, Portugal 5-11 septiembre de 2004

J. Fernando Barbero GonzálezUniversidade da Beira Interior, Portugal5-11 septiembre de 2004

Guillermo A. Mena Marugán Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, México 3-9 noviembre de 2004

4.7.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

E. Garrido

Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, Dinamarca 29 de Marzo al 7 de Abril

J. Dukelsky

Laboratorio Nacional de los Alamos, USA. 10-21 Marzo 2004

J. Dukelsky

Laboratorio Nacional de Oak Ridge, USA 22 Septiembre a 2 Octubre de 2004

M^a José G^a Borge ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza 25 abril – 02 mayo

Mª José Gª Borge ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza 22-23 enero, 22-23 febrero, 22-24 mayo, 31 julio – 13 agosto, 16-22 octubre, 14-16 noviembre

O. Tengblad JYFL, Jyväskylä, Finlandia 15 – 22 enero

O. Tengblad JYFL, Jyväskylä, Finlandia 13 – 22 febrero

Rafik Boutami IGISOL, JYFL, Jyväskylä, Finlandia 23 de febrero al 7 de marzo

Mª José Gª Borge

Instituto de Física y astronomía, Universidad de Aarhus, Aarhus, Dinamarca 20-26 marzo

O. Tengblad

ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza

25 abril – 02 mayo

O. Tengblad

ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza

23 junio – 2 julio

Rafik Boutami

ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza

26 de julio al 13 de agosto

O. Tengblad

ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza

31 julio – 13 agosto

Rafik Boutami

Neutron Research Laboratory, NFL, Universidad de Uppsala, Nyköping, Suecia 4 – 29 octubre

Diego Escrig Forano

C.E.R.N., Suiza

11-20 octubre 2004

O. Tengblad

ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza

7 - 25 octubre

O. Tengblad

CRC, Louvain-la-Neuve, Belgica

8 – 18 diciembre

Diego Escrig Forano

C.R.C Louvain-la-Neuve, Bélgica

12-19 diciembre 2004

M. Turrión

CERN, Suiza

20 abril – 2 junio, 24 septiembre-22 noviembre, 4-18 diciembre

F. J. Bermejo

Centre de Recherche sur la Matière Divisée, Orleáns, Francia Junio-Julio 2004

4.7.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Victor J. Herrero, R. Escribano Abteilung Physikalische Chemie. Institut für Materialchemie, Technische Universität Wien (Viena, Austria) Marzo 2004 (1 semana)

R. Escribano Universidad de Bolonia (Italia) Junio 2005 (1 semana)

Dionisio Bermejo Plaza Universidad de Bolonia, Italia Fecha: octubre 2004

4.7.4 DPTO, DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo Santiago de Chile, (Chile) 2-9 de octubre

J. Martín-PintadoUniv de Leiden, Leiden (Holanda)1-8 de septiembre

M.L. Senent Universidad de Chile, Santiago de Chile (Chile) 12-18 de marzo

M.L. Senent Universidad de antofagasta, antofagasta(Chile) 22-30 de marzo

M.L. Senent Observatorio de Meudon, Paris (Francia) 22-28 de noviembre

Luis Colina UNAM, Mexico D.F. 13-19 de febrero

Luis Colina Instituto de Astronomia de Cambridge, Reino Unido 6-10 de septiembre

Almudena Alonso Herrero Steward Observatory, University of Arizona, EEUU Marzo, abril, mayo, octubre y noviembre 2004 Almudena Alonso Herrero Institute of Astronomy, University of Cambridge, Reino Unido Julio 2004

Juan Ramón Pardo Observatoire de Paris, Paris (Francia) 19-25 de mayo, 14-20 de octubre

Juan Ramón Pardo

Observaciones en el Caltech Submillimeters Observatory, Hilo (Hawai'i) 1-12 de junio, 27 de diciembre-7 de enero 2005

Marcelino Agúndez Chico Escuela de Interferometría de IRAM, Grenoble (Francia) 20-27 de noviembre

Marcelino Agúndez Chico Observaciones Arp220 en el Caltech Submillimeters Observatory, Hilo (Hawai) 27 de diciembre- 7 de enero de 2005

Miguel A. Requena Torres Escuela de Interferometría de IRAM, Grenoble (Francia) 20-27 de noviembre

Izaskun Jiménez Serra Escuela de Interferometría de IRAM, Grenoble (Francia) 20-27 de noviembre

Izaskun Jiménez Serra Escuela de Interferometría de NRAO, Socorro (USA) 15-22 de Junio

Belén Tercero Escuela de Interferometría de IRAM, Grenoble (Francia) 20-27 de noviembre

Javier Corrales SRON, Groningen (Holanda) Febrero, 14 junio-16 julio, 13-29 de octubre

Macarena García Space Telescope and Science Institute (STScI), Estados Unidos 29 de febrero-15 de mayo

Helena Massó Université de Marne la Vallée, París, Francia. 30 de septiembre – 1 de diciembre

F. Najarro STSI, Baltimore, Estados Unidos

junio

F. Najarro

FLAMES, Munich (Alemania).

8-14 de noviembre

J. Rodríguez Goicoechea

ENS, Paris, Francia

1-11 de diciembre

J. Rodríguez Goicoechea

ENS, Paris, Francia

17-23 de diciembre

4.7.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José Vicente García Ramos

Facultad de Ciencias. Universidad de Chile. Santiago. Chile

Noviembre-Diciembre 2004

José Vicente García Ramos

Centro di studi sulla Spettroscopia Raman. Universitá di Bologna. Italia.

Octubre de 2004

Santiago Sánchez Cortés

Dipartimento di Scienze e Technologie Agroalimentari, (DISTA).Universidad de

Bolonia. Italia.

Septiembre de 2004

M. Santos

Academia de Ciencias de la República Checa. Instituto de Procesos Químicos Fundamentales.

20-26 de Septiembre de 2004.

4.7.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Dra. M.E. Cagiao

Université Ferhat Abbas, Sétif (Argelia). Miembro del Tribunal en la lectura de una Tesis Doctoral.

27 Abril-4 Mayo.

Dra. Mª José Capitán

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania).

Experimentación, HASYLAB.

6-16 Marzo y 10 Mayo-15 Junio.

D. Alejandro Sanz Parras

Chemistry Department, State University of New York at Stony Brook, Stony Brook, NY (USA). Experimentación en el laboratorio del Dr. B.S. Hsiao. 5 Junio-5 Septiembre.

D. Alejandro Sanz Parras

National Synchrotron Light Source (Brookhaven National Laboratory, NY (USA) Junio-Agosto.

Dña. Inés Puente Orench Institut für Technische und Makromolekulare Chemis, Universität Hamburg. 1 Abril-25 Julio.

4.8 ESTUDIANTES BECADOS Y ESTANCIAS INFERIORES A 6 MESES

4.8.5. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Alexandre Mantion University of Basel, Suiza 18-29 Octubre Entidad financiadora: Swiss Science Foundation

4.8.6. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Eva Bosch Department of Polymer Engineering, Universität Bayreuth (Alemania) 7 Enero-26 Marzo 2004 ERASMUS (EU Programme)

Andreas Ueberschaer Universidad de Kassel, Kassel (Alemania) 1 Mayo-30 Septiembre 2004 LEONARDO (EU Programme)

Capítulo 5

ACTIVIDAD DOCENTE Y OTRAS

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.1.2. DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

E. Moya de Guerra Física Nuclear y Fusión Universidad Complutense de Madrid Madrid, Mayo Nº de créditos: 1

M.J.G. Borge Física Nuclear y Fusión Universidad Complutense de Madrid Madrid, Mayo

Nº de créditos: 1 (Del programa de Fusión conjunto CIEMAT-UCM-UAM-CSIC)

5.1.4. DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo Astrofísica Molecular Ciencias Físicas U. A. M. Marzo-Abril 2004 Nº de créditos: 3 (30 horas)

J. Cernicharo
Molecular Astrophysics
Sciences U. Porto (Portugal)
8-14 Noviembre 2004

Nº de créditos: 30 horas (20 teóricas + 10 prácticas)

5.1.5. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José Vicente García Ramos Espectroscopía Raman: Nuevas tendencias y aplicaciones Facultad de Ciencias. UNED. Enero-Septiembre 2004 Nº de créditos: 6

5.2. CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor Topología Cósmica Universidad Complutense de Madrid 21 de enero de 2004 J. Fernando Barbero González Desarrollos asintóticos de integrales IMAFF-CSIC 5 de marzo de 2004

J. Fernando Barbero González El brillante presente de la cosmología Universidad Carlos III de Madrid 14 de marzo de 2004

Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor Asymptotics of Regulated Field Commutators for Einstein-Rosen Waves Pennsylvania State University 16 de abril de 2004

Guillermo A. Mena Marugán Particles and Vacuum for Perturbative and Non-Perturbative Cylindrical Gravity Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, México 3 de noviembre de 2004

J. Fernando Barbero González El brillante presente de la cosmología IEM-CSIC (IV Semana de la Ciencia) 19 de noviembre de 2004

5.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

E. Moya de GuerraProcesos Electrodébiles y Estructura NuclearCSIC1 de Abril

J. Dukelsky

New generalizations of the Richardson-Gaudin integrable models. Oak Ridge National Laboratory, USA. 23 Octubre de 2004

J. Dukelsky

Recent developments in the Richardson-Gaudin integrable models. Universidad de Orsay. Francia.

2 Diciembre de 2004

M^a José G^a Borge Symmetries in beta transitions in the A = 9 isobars Fac de Ciencias Fisicas,, Universidad de Jyväskylä (Finlandia) 4 de marzo

Ma José Ga Borge

El Núcleo: Un viaje al centro de la materia

IEM, CSIC, Madrid España

12 noviembre

M. Turrión

Present Status of the TARGISOL database and web application Ludwig Maximilians Universitaet Munich, Alemania 9 diciembre

Mª José Gª Borge

Beta-delayed multi-particle emission at ISOL-type facilities Centre d'Études Nucleaires de Bordeaux-Gradignan 3- diciembre

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Isabel Tanarro

Diagnóstico y cinética de plasmas fríos Ciclo de Conferencias del Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 19 Octubre

R. Escribano

Spettroscopia di idrati di acido nitrico Universidad de Bolonia, Italia 15 de Junio

R. Escribano

Spectroscopy of nitric acid hydrates Technische Universität Wien (Viena, Austria) 24 de Marzo

J. M. Fernández

Estudios Intermoleculares de Hidrógeno por Espectroscopía Raman IMAFF (CSIC), Madrid 21 junio

S. Montero

Structure, Properties and Applications of Free Jets in Molecular Physics Physical & Chemical Graduate School, Universidad de Göttingen, Alemania 30 junio

S. Montero

Estructura, Propiedades y Aplicaciones de los Jets Supersónicos en la Química-Física Universidad de Valladolid, Valladolid 19 noviembre

5.2.4 DPTO, DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo

El Universo Frío. : Moléculas en el Cosmos Circulo de Bellas Artes. Madrid. España

16 de Noviembre

M.L. Senent

Introducción a la astrofísica molecular. Espectroscopia de microondas teórica BUAP-INAOE, Puebla, Mexico 28 de junio-2 de julio

M.L. Senent

La investigación en el DAMIR: la sinergia entre la Astrofisica y la Química Física BUAP-INAOE, Puebla, Mexico 28 de junio-2 de julio

M.L. Senent

Moléculas orgánicas no-rígidas de interés en astroquímica: la glicina y el glicoaldehido Institución y país: Facultad de Química de la Pontificia Universidad Católica de Chile, Marzo

M.L. Senent

Moléculas orgánicas no-rígidas de interés en astroquímica: la glicina y el glicoaldehido Universidad Autónoma Metropolitana de Mexico, Mexico DF. Julio

F. Najarro Las estrellas mas masivas IEM, Madrid, España Noviembre

5.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José Vicente García Ramos

Some applications of $\mu Raman$ and $\mu SERS$: Detection of PAHs and Study of Chromosomes.

Centro di studi sulla Spettroscopia Raman. Universitá di Bologna. Italia. Octubre

José Vicente García Ramos

Vibrational Spectroscopy on Metallic Nanostructures (SERS and SEIR):New Substrates and Applications

Facultad de Ciencias. Universidad de Chile. Santiago. Chile.

Noviembre

José A. Sánchez Gil

Fotónica de plasmones superficiales en metales nanoestructurados Instituto de Estructura de la Materia (CSIC, Madrid) 29.1.2004

Magna Santos

Nanostructured deposits from mixtures of iron pentacarbonyl and silacyclopentene. Instituto de Procesos Químicos Fundamentales. Republica Checa 21 de Septiembre de 2004

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Prof. Manfred Pilkuhn Gallium nitride based nano devices Instituto de Microelectrónica de Madrid (IMM) 24 de marzo de 2004

D. Alejandro Sanz Parras

Dinámica y estructura durante la cristalización en sistemas formadores de vidrio: Isopropanol frente a poli(butilen isoftalato)
Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (IMAFF)
29 de marzo de 2004

Prof. Manfred Pilkuhn

Molecular Electronics: New Prospects for Information Technology Dpto. de Física de Materiales de la Universidad Autónoma de Madrid 7 de mayo de 2004

Prof. F.J. Baltá Calleja

Advances in microhardness-nanostructure correlations of Polymer materials Institute of Materials Engineering, Technical University of Szczecin, Szczecin (Polonia). 5 Octubre 2004

A. Muñoz-Escalona

Materiales Polímeros

Departamento de Ingeniería de Materiales. Universidad Rey Juan Carlos. Móstoles. Curso cuatrimestral (total 24 horas)

A. Muñoz-Escalona

Fundamentos de Química Macromolecular. Instituto Superior de la Energía, ISE Fundación Repsol-YPF, Móstoles Curso (total 15,5 horas)

J. F. Vega

Reología y dinámica molecular de polímeros modelo Facultad de Químicas de San Sebastián. Universidad del País Vasco, San Sebastián Conferencia invitada

J. F. Vega

Reología y dinámica molecular de redes poliméricas y geles Facultad de Farmacia. Universidad Complutense de Madrid Conferencia invitada

5.3. CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

5.3.2. DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

Carmen Angulo Nuclear Astrophysics Exploring the Universe in a laboratory CSIC, Madrid 31 Marzo

5.3.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

J. M. Fernández

Espectroscopía Raman en Chorros Supersónicos I Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia 1 abril 2004

5.3.4. DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo

Radiative transfer modeling of water Leiden (Holanda) 21-24 Marzo

J. Cernicharo, M.L. Senent

Workshop Paris-Madrid on Quantum Chemistry and Astrophysics CSIC, Madrid 21-22 de octubre

J. Cernicharo

Preparatory Science of Herschel & ALMA Leiden (Holanda). Lorentz Center 15-17 Diciembre 2004

5.3.5. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José A. Sánchez Gil Surface Plasmon Photonics Sesión organizada y presidida dentro del congreso PROGRESS IN ELECTROMAGNETICS RESEARCH Symposium (PIERS 2004), Pisa (Italia) 28-31 Marzo 2004

5.3.6. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

T.A. Ezquerra

Reunión como Coordinador para definir las líneas del futuro Sincrotrón Español AURORA. CFMAC.

9 Enero.

Reunión preparatoria del próximo Congreso "AUSE". CFMAC. 23 Enero

A. Flores

"Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: desde las Partículas Subatómicas a los Compuestos Moleculares", IEM. 1 y 2 Abril.

"Nanoestructura y propiedades físicas de materiales poliméricos" dentro del Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia.

2 Abril

Aurora Nogales

"Dinámica molecular y desarrollo nanoestructural en polímeros". Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: desde las Partículas Subatómicas a los Compuestos Moleculares, IEM. 2 Abril.

M.C. García Gutiérrez

Luz Sincrotrón y materia condensada. Ciclo de Seminarios 2003-2004. CFMAC. 18 Febrero.

J. Martínez Salazar

La cadena de conocimiento en la ciencia de los polímeros: del diseño a la aplicación. Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: desde las Partículas Subatómicas a los Compuestos Moleculares, IEM. 2 Abril

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

5.4.2. DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

E. Moya de Guerra

- Miembro del Comité Científico Asesor del CSIC (por designación de Presidencia)
- Miembro del Board of Directors del European Center for Theoretical Nuclear Physics and Related Areas (ECT*).
- Miembro del Comité Científico y Presidente de Sesión de la Conferencia Internacional INPC-2004 (Suecia)
- Miembro del Comité Científico de la Conferencia Internacional VIII Spring Seminar on Nuclear Physics (Italia)
- Presidente de Sesión del Workshop on Spectroscopic Factors (Italia)
- Miembro de EXL-Coordination Committee

Mª José García Borge

- -Representante Español en el Comité de la Colaboración ISOLDE (CERN, Suiza) desde 2003-2005.
- -Presidente de sesión en la conferencia internacional de Física Nuclear INPC04

5.4.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

R. Escribano

Presidente del Comité Organizador del "19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy", a celebrar en Septiembre 2005

Salvador Montero Martín

Miembro del Comité Editorial del Journal of Raman Spectroscopy, Wiley (Reino Unido)

5.4.5. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Juana Bellanato. Miembro del "International Committee" del XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy (Cracovia, Polonia). Asistencia a una Reunión del Comité.

Juana Bellanato. Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral:

"Diseño, síntesis, estudio estructural y farmacológico de nuevos ligandos de receptores nicotínicos con acción analgésica", de Dña. Ana. Isabel Madrid González, Facultad de Farmacia, Universidad de Alcalá, Mayo 2004

C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, P. Leyton, M. Campos-Vallette, C. Saitz ay R. E. Clavijo.

Premio del XVII European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS) a la contribución en panel más sobresaliente.

Comité Organizador del EUCMOS XVII. AGH University of Science and Technology. Polonia.

Septiembre

5.4.6. 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
- Láser de electrones libres europeo

DESY, Alemania

2004-2007

Tiberio A. Ezquerra

Miembro del Comité: Subcommittee on "Soft Condensed Matter and Biological Materials", European Synchrotron Radiation Facility

(ESRF) Grenoble, Francia

2003-2005

J. Martínez de Salazar

Executive Board of the European Polymer Federation

European Science Foundation Desde marzo 1996-hasta la fecha

J. Martínez de Salazar Consejo Rector del CSIC Ministerio de Ciencia y Tecnología Desde marzo 1999-hasta la fecha

CAPÍTULO 6

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS

6.1.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

1. Barbero G. J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J.

Time Uncertainty in Quantum Gravitacional Systems

Physical Review D

Volumen: 69

Página inicial: 044017-1

Página final: 044017-4 Indice de impacto: 4,599

2. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J.

Quantum Cylindrical Waves and Sigma Models Internacional Journal of Modern Physics D

Volumen: 13

Página inicial: 1119

Página final: 1127

Indice de impacto: 1,618

3. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J. Particles and Vacuum for Perturbative and Non-Perturbative Einstein-Rosen Gravity Physical Review D

Volumen: 70

Página inicial: 044028-1

Página final: 044028-14

Indice de impacto: 4,599

4. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J. Asymptotic Analysis of Field Commutators for Einstein-Rosen Gravitacional Waves Journal of Mathematical Physics

Volumen: 45

Página inicial: 3498

Página final: 3532

Indice de impacto: 1,481

5. Galán, Pablo; Mena Marugán, Guillermo A.

Quantum Time Uncertainty in a Gravity's Rainbow Formalism

Physical Review D

Volumen: 70

Página inicial: 124003-1

Página final: 124003-9 Indice de impacto: 4,599

6. Jaramillo, José L.; Gourgoulhon, E.; Mena Marugán, Guillermo A.

Inner Boundary Conditions for Black Hole Intital Data Derived from Isolated

Horizons

Physical Review D

Volumen: 70

Página inicial: 124036-1 Página final: 124036-13

Indice de impacto: 4,599

7. Barbero G., J. Fernando; S. Villaseñor, Eduardo J. Lorentz Violations and Euclidean Signature Metrics

Physical Review D

Volumen: 68

Página inicial: 087501-1

Página final: 087501-2 Indice de impacto: 4,599

8. Garay, Luis J.; Barceló, Carlos.

Agujeros Negros en Condensados de Bose-Einstein

Investigación y Ciencia

Febrero, 2004

Página inicial: 48

Página final: 58

9. Bellucci, S.; González, J.; Onorato, P.

Doping- and size-dependent suppression of tunneling in carbon nanotubes

Physical Review B

Volumen: 69

Página inicial: 085404-1

Página final: 085404-6 Indice de impacto: 2,96

10. González, J.; Alvarez, J. V.

Phase diagram of carbon nanotube ropes

Physical Review B

Volumen: 70

Página inicial: 045410-1

Página final: 045410-14 Indice de impacto: 2,96

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

1. Poirier, E.; Marechal, F.; Dessagne, Ph.; Algora, A.; Borge, M.J.G.; Cano-Ott, D.; Caspar, J.C.; Courtin, S.; Devin, J.; Fraile, L.M.; Gelletly, W.; Heitz, G.; Jungclaus, A.; Le Scornet, G.; Miehé, Ch.; Nácher, E.; Rubio, B.; Sarriguren, P.; Tain, J.L.; Tengblad, O.; Weber, C.

B(GT) strength from beta-decay neasurements and inferred shape mixing in ⁷⁴Kr

Phys. Rev. C Volumen: 69

Página inicial: 034307-1 Página final: 034307-8

Indice de impacto:2,708

2. Nácher, E.; Algora, A.; Rubio, B.; Tain, J.L.; Cano-Ott, D.; Courtin, S.; Dessagne, Ph.; Marechal, F.; Miehé, Ch.; Poirier, E.; Borge, M.J.G.; Escrig, D.; Jungclaus, A.; Sarriguren, P.; Tengblad, O.; Gelletly, W.

Deformation of the N=Z nucleus ⁷⁶Sr using beta-decay studies

Phys. Rev. Lett Volumen: 92

Página inicial: 232501-1 Página final: 232501-4

Indice de impacto:7,035

3. Martínez, M.C.; Vignote, J.R.; Caballero, J.A.; Donnelly, T.W.; Moya de Guerra, E.; Udías, J.M.

Análisis of polarized ¹⁶O(e, e'p) observables within the relativistic distorted wave impulse approximation

Phys. Rev. C Volumen: 69

Página inicial:034604-1 Página final:034604-10

Indice de impacto:2,708

4. Antonov, A.N.; Gaidarov, M.K.; Kadrev, D.N.; Hodgson, P.E.; Moya de Guerra, E. Charge density distributions and related form factors in neutron-rich light exotic nuclei

Int. J. Mod Phys E Volumen: 13

Página inicial:759 Página final: 772

Indice de impacto:0,753

5. Vignote, J.R.; Martínez, M.C.; Caballero, J.a.; Moya de Guerra, E.; Udías, J.M.

A (e, e'p) B responses: from bare nucleons to complex nuclei

Revista: Phys. Rev. C

Volumen: 70

Página inicial:044608-1 Página final: 044608-12

Indice de impacto:2,708

6. Antonov, A.N.; Gaidarov, M.K.; Kadrev, D.N.; Ivanov, M.V.; Moya de Guerra, E.; Udías, J.M.

Superscaling in nuclei: A search for scaling function beyond the relativistic Fermi

Gas Model Phys. Rev. C

Volumen: 69

Página inicial:044321-1

Página final:044321-7 Indice de impacto:2,708

7. Raduta, A.A.; Escuderos, A.; Faessler, A.; Moya de Guerra, E.; Sarriguren, P.

Two neutrino double beta decay in deformed nuclei with angular momentum projected basis

Phys. Rev. C Volumen:69

Página inicial: 064321-1

Página final: 064321-20 Indice de impacto:2,708

8. Álvarez-Rodríguez, R.; Sarriguren, P.; Moya de Guerra, E.; Pacearescu, L.; Faessler, A.; Simkovic, F.

Deformed QRPA formalism for single and two-neutrino double beta decay

Revista: Phys. Rev. C

Volumen: 70

Página inicial: 064309-1

Página final: 064309-13 Indice de impacto:2,708

9. Garrido, E.; Fedorov D.V.; Jensen, A.S.

Three-body Structures of the low-lying 17Ne states

Nuclear Physics A Volumen:733

Página inicial: 85

Página final: 109

Indice de impacto: 1,761

10.Jensen, A.S.; Riisager, K.; Fedorov, D.V.; Garrido, E.

Structure and Reactions of Quantum Halos

Reviews of Modern Physics

Volumen: 76

Página inicial: 215 Página final: 261

Indice de impacto: 28,172

11. Garrido, E.; Fedorov, D.V.; Jensen, A.S.

Three-body Thomas-Ehrman Shifts of Analog States od 17Ne and 17N

Physical Review C

Volumen: 69

Página inicial: 024002 Página final: 024009

Indice de impacto: 2,708

12. Garrido, E.; Fedorov, D.V.; Jensen, A.S.

From Two-body Resonances to Three-body Borromean States

Few-Body Systems

Volumen: 34

Página inicial: 91 Página final: 96

Indice de impacto: 1,034

13. Fedorov D.V.; Fynbo, H.O.U.; Garrido, E.; Jensen, A.S.

Description of Decays of Three-body Resonances

Few-Body Systems

Volumen: 34

Página inicial: 33 Página final: 37

Indice de impacto:1,034

14. Garrido, E.; Fedorov, D.V.; Jensen A.S

Origin of borromean systems

Physics Letters B Volumen: 600

Página inicial: 208 Página final: 214

Indice de impacto: 4,066

15. Dukelsky, J.; Pittel, S.

The density matriz renormalization group for finite fermi systems.

Rep. Prog. Phys. Volumen: 67

Página inicial: 513 Página final:552

Indice de impacto: 8,409

16. Pollet, L.; Rombauts, S.; Heyde, K.; Dukelsky, J.

Bosons confined in optical lattices: The numerical renormalization group revisited

Phys. Rev. A Volumen:69

Página inicial: 043601-1 Página final: 043601-10

Indice de impacto: 2,589

17. Vidal, J.; Mosseri, R.; Dukelsky, J.

Entanglement in a first order quantum phase transition.

Phys. Rev. A Volumen:69

Página inicial: 054101-1 Página final: 054101-4

Indice de impacto: 2,589

18. Relaño, A.; Dukelsky, J.; Gomez, J.M.G.; Retamosa, J.

Stringent numerical test of the Poisson distribution for finite quantum integrable Hamiltonians.

Phys. Rev. E Volumen: 70

Página inicial: 026208-1 Página final: 026208-5

Indice de impacto: 2,202

19. Rombouts, S.; Van Neck, D.; Dukelsky, J.

Solving the Richardson equations for Fermions.

Phys. Rev. C Volumen: 69

Página inicial: 061303-1 Página final: 061303-4

Indice de impacto: 2,708

20. Dukelsky, J.; Dussel, G.G.; Esebbag, C.; Pittel, S.

Exactly-solvable models for atom-molecule hamiltonians.

Phys. Rev. Lett. Volumen:93

Página inicial: 050403-1 Página final: 050403-4

Indice de impacto: 7,035

21. Sierra, G.; Roman, J.M.; Dukelsky, J.

The elementary excitation of the BCS model in the canonical ensemble.

Int. J. Mod. Phys. A

Volumen:19

Página inicial: 381 Página final:395

Indice de impacto:0,906

22. Dukelsky, J.; Dussel, G.G.; Pittel, S.

Exactly solvable models for trapped boson systems.

Opt. Commun Volumen:243

Página inicial:131 Página final:143

Indice de impacto: 1,482

23. Arias, J.M.; García-Ramos, J.E.; Dukelsky, J.

Phase diagram of the proton-neutron interacting boson model

Phys. Rev. Lett Volumen:93

Página inicial: 212501-1 Página final: 212501-4

Indice de impacto: 7,035

24. Dukelsky, J.; Pittel, S.; Sierra, G.

Exactly solvable Richardson-Gaudin models for many-body quantum systems.

Rev. Mod. Phys. Volumen:76

Página inicial: 643 Página final: 662

Indice de impacto: 28,172

25. Tengblad, O.; Bergmann, U.C.; Fynbo, H.O.U.; Fraile, L.M.; Walsh, S.

Novel thin window design for a large area Silicon Strip Detector

Nucl. Instrum Meth A

Volumen: 525

Página inicial: 438 Página final: 464

Indice de impacto: 1,16

26.Goldberg, V.Z.; Rogachev, G.; Trzaska, W.H.; Kolata, J.J.; Andreyev, A.; Angulo, C.; Borge, MJG; Cherubini, S.; Chubarian, G.G.; Van Duppen, P.; Gorska, M.; Gulino, M.; Huyse, M.; Kallman, K.M.; Lattuada, M.; Lonnroth, T.; Mutterer, M.; Raabe, R.; Romano, S.; Rozhkov, M.; Skorodumov, B.B.; Spitaleri, C.; Tengblad, O.; Tumino, A.

Investigation of the α -cluster structure of ²²Ne and ²²Mg

Phys. Rev. C Volumen: 69

Página inicial: 024602-1 Página final: 024602-10

Indice de impacto: 2,097

27. Fynbo, H.O.U.; Borge, M.J.G.; Cederkall, J.; Courtin, S.; Dessagne, P.; Jonson, B.; Le Scornet, G.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Poirier, E.; Riisager, K.; Tengblad, O.; Wilhelmsen, K.

New information on the β -decay of ¹¹Li from Doppler broadened lines

Nucl. Phys. A Volumen: 736

Página inicial: 39 Página final: 54

Indice de impacto: 1,761

28. Fynbo, H.O.U.; Diget, C.A.; Prezado, Y.; Aysto, J.; Bergmann, U.C.; Borge, M.J.G; Cederkall, J.; Dendooven, P.; Fraile, LM; Franco, S.; Fulton, BR; Huang, W.; Huikari, J.; Jeppesen, H.; Jokinen, A.; Jonson, B.; Jones, P.; Koster, U.; Meister, M.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Borge, MJG.; Riisager, K.; Rinta-Antila, S.; Vogelius, IS; Tengblad, O.; Turrion, M.; Wang, Y.; Weissman, L.; Wilhelmsen, K.

News on C-12 from beta-decay studies

Nucl. Phys. A Volumen: 738 Página inicial: 59

Página final: 65

Indice de impacto: 1,761

29. Borge, M.J.G.; Prezado, Y.; Bergmann, U.C.; Boutami, R.; Cederkäll, J. C.; Diget, Aa.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Jading, Y.; Jeppesen, H.; Jonson, B.; Martel, I.; Meister, M.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Riisager, K.; Simon, H.; Tengblad, O.; Weissman, L.; Wenander, F.; Wilhelmsen. K.

Asymmetry in the super-allowed b-transitions of the A=9 isobars

Nucl Phys A Volumen: 738

Página inicial: 206

Página final: 210

Indice de impacto:1,761

30.Algora, A; Batista, L.; Borge, M.J.G.; Cano-Ott, D.; Collatz, R.; Courtin, S.; Dessagne, P.; Fraile, L.M.; Gadea, A.; Gelletly, W.; Hellstrom, M.; Janas, Z.; Jungclaus, J.; Kirchner, R.; Karny, M.; Le Scornet, G.; Mieh, Ch.; Marechal, F.; Nacher, E.; Poirier, E.; Roeckl, E.; Rubio, B.; Ryckaczewski, K.; Tain, J.L.; Tengblad, O.; Wittman, V.

Beta-decay studies using total absorption spectroscopy

Eur. Phys. J A Volumen: 20

Página inicial: 199

Página final: 202

Indice de impacto: 2,097

31.Dessagne, P.; Borge, M.J.G.; Giovinazzo, J.; Huck, A.; Jokinen, A.; Knipper, A.; Longour, C.; Marguier, G.; Ramdhane, M.; Rauch, V.; Tengblad, O.; Walter, G.; Miehe, Ch..

The N=Z nucleus ⁷⁶Sr: Gamow-Teller strength and nuclear deformation

Eur. Phys. J A Volumen: 20

Página inicial: 405

Página final: 411

Indice de impacto: 2,097

32. Nacher, E.; Algora, A.; Rubio, B.; Tain, J.L.; Cano-Ott, D.; Borge, M.J.G.; Courtin, S.; Dessagne, Ph.; Escrig, D.; Fraile, L.M.; Gelletly, W.; Jungclaus, A.; Le Scornet, G.; Marchal, F.; Mieh, Ch.; Poirier, E.; Tengblad, O.

Total absorption spectroscopy of ⁷⁶Sr with the LUCRECIA spectrometer at ISOLD

Nucl. Phys. A Volumen: 734

Página inicial: E84 Página final: E87

Indice de impacto: 1,761

33.Simon, H.; Aumann, T.; Borge, M.J.G.; Chulkov, L.V.; Elze, THW; Emling, H; Forssen, C.; Geissel, H.; Hellstrom, M.; Jonson, B.; Kratz, J.V.; Kulessa, R.; Leifels, Y.; Markenroth, .; Meister, M.; Munzenberg, G.; Nickel, F.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Pribora, V.; Richter, A.; Riisager, K.; Scheidenberger, C.; Schrieder, G.; Tengblad, O.; Zhukov, M.V.

Two- and three-body correlations: breakup of halo nuclei

Nucl. Phys. A Volumen: 734

Página inicial: 323 Página final: 326

Indice de impacto: 1,761

34. Borge, M.J.G.; Bergmann, U.C.; Boutami, R.; Cederkäll, J.; Dendooven, P.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Huang, W.X.; Huikari, J.; Jading, Y.; Jeppesen, H.; Jokinen, A.; Jonson, B.; Martel, I.; Meister, M.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Prezado, Y.; Riisager, K.; Tengblad, O.; Weissman, L.; Wilhelmsen, K.; Äystö, J.

Beta-delayed multiparticle emission studies at ISOL-type facilities

Nucl Phys A Volumen: 746

Página inicial: 243c Página final: 247c

Indice de impacto: 1,761

35. Turrion, M.; Borge, M.J.G.; Tengblad, O.

Database for ISOL-production optimization with web access

Nucl. Phys. A Volumen: 746

Página inicial: 441c Página final: 444c

Indice de impacto: 1,761

36. Prezado, Y.; Bergmann, U.C.; Borge, M.J.C.; Cederkall, J.; Fraile, L.M.; Fynbo, H.O.U.; Jeppesen, H.; Jokinen, A.; Jones, P.; Jonson, B.; Meister, M.; Nilsson, T.; Nyman, G.; Riisager, K.; Tengblad, O.; Weissmann, L.; Wilhelmsen, K.

The β -decay of 9 Li to the high lying states of 9 Be

Nucl. Phys. A

Volumen: 746

Página inicial: 518c Página final: 521c

Indice de impacto: 1,761

37. Escrig, D.; Jungclaus, A.; Binder, B.; Dietrich, A.; Härtlein, T.; Bauer, H.; Gund; Ch.; Pansegrau, D., Schwalm, D.; Bazzacco, D.; de Angelis, G.; Farnea, E.; Lunardi, S.; Napoli, D.R.; Rossi Alvarez, C.; Ur, C.A.

Rotational bands in neutron-rich ^{160,161,162}Ho

Eur. Phys. J. A Volumen: 21 Página inicial: 67

Página final: 74

Indice de impacto: 2,097

38. Jungclaus, A.; Algora, A.; Axiotis, M.; Borge, M.J.G.; Frenández, M.A.; Gadea, A.; Galindo, E; Hausmann, M.; Lenzi, S.; Martínez, T.; Napoli, D.R.; Piqueras, I.; Schwengner, R.; Ur, C.

High-spin states in the vibrational nucleus ¹¹⁴Cd

Eur. Phys. J. A Volumen: 20 Página inicial: 55

Página final: 56

Indice de impacto: 2,097

39.Cortina-Gil, D.; Fernandez-Vazquez, J.; Aumann, T.; Baumann, T.; Benlliure, J.; Borge, M.J.G.; Chulkov, L.V.; Datta Pramanik, U.; Forssén, C.; Fraile, L.M.; Geissel, H.; Gerl, J.; Hammache, F.; Itahashi, K.; Janik, R.; Jonson, B.; Mandal, S.; Markenroth, K.; Meister, M.; Mocko, X.; Münzenberg, G.; Ohtsubo, T.; Ozawa, A.; Prezado, Y.; Pribora, V.; Riisager, K.; Scheit, H.; Schneider, R.; Schrieder, G.; Simon, H.; Sitar, B.; Stolz, A.; Strmen, P.; Sümmerer, K.; Szarka I.; Weick, H.

Shell structure of the Near-Dripline Nucleus ²³O

Phys Rev. Lett. Volumen: 93

Página inicial: 062501-1

Página final: 062501-4 Indice de impacto: 7,035

40. Cortina-Gil, D.; Fernandez-Vazquez, J.; Aumann, T.; Baumann, T.; Benlliure, J.; Borge, M.J.G.; Chulkov, L.V.; Datta Pramanik, U.; Forssén, C.; Fraile, L.M.; Geissel, H.; Gerl, J.; Hammache, F.; Itahashi, K.; Janik, R.; Jonson, B.; Mandal, S.; Markenroth, K.; Meister, M.; Mocko, X.; Münzenberg, G.; Ohtsubo, T.; Ozawa, A.; Prezado, Y.; Pribora, V.; Riisager, K.; Scheit, H.; Schneider, R.; Schrieder, G.; Simon, H.; Sitar, B.; Stolz, A.; Strmen, P.; Sümmerer, K.; Szarka, I; Weick, H.

Nuclear structure of light exotic nuclei from break-up reactions

Nucl. Phys. A Volumen: 746

Página inicial: 479c Página final: 482c

Indice de impacto: 1,761

41.Maira-Vidal, A; Gonzalez, MA; Jimenez-Ruiz, M; Bermejo, FJ; Price, DL; Enciso,E, Saboungi, ML; Fernandez-Perea, R; Cabrillo, C.

Unconventional density dependence of the stochastic dynamics in an organic liquid

Revista: Phys. Rev. E

Volumen:70

Página inicial:021501-1 Página final:021501-9

Indice de impacto: 2,202

42.Bermejo, FJ; Howells, WS; Jimenez-Ruiz, M; Gonzalez, MA; Price, DL; Saboungi, ML; Cabrillo, C.

Origin of the complex dielectric relaxation spectra of molecular glass formers

Phys. Rev. B Volumen:69

Página inicial: 174201-1 Página final: 174201-7

Indice de impacto: 2,962

43. Gonzalez, MA; Bermejo, FJ; Enciso, E; Cabrillo, C.

Hydrogen bonding in condensed-phase alcohols: some keys to understanding their structure and dynamics

Philos. Mag. Volumen: 84

Página inicial: 1599 Página final: 1607

44. Cabrillo, C; Gonzalez, MA; Cuello, GJ; Bermejo, FJ; Saboungi, ML; Price, DL Microscopic origin of the non-Gaussian behavior of dynamic structure factors of glassy matter

Phys Rev B Volumen:69

Página inicial: 134202-1 Página final: 134202-10

Indice de impacto: 2,962

45. Cuello, GJ; Fernandez-Perea, R; Cabrillo, C; Bermejo, FJ; Roman-Ross, G.

Microscopic structure of Fe-Ni and Fe-Ni-S molten alloys of geophysical interest

Phys. Rev. B Volumen:69

Página inicial: 094201-1 Página final: 094201-9

Indice de impacto: 2,962

46.Cabrillo, C; Bermejo, FJ; Maira-Vidal ,A; Fernandez-Perea ,R; Bennington,SM; Martín,D

Microscopic dynamics in simple liquids: a clue to understanding the basic thermodynamics of the liquid state

J. Phys. Condens. Matt.

Volumen: 16

Página inicial: S309 Página final: S325

Indice de impacto: 1,757

47. Dawidowski, J; Bermejo, F.J.; Ristig, ML; Fak, B; Cabrillo, C; Fernández-Perea, R; Kinugawa, K; Campo, J.

Static structure factor of liquid parahydrogen

Phys. Rev. B Volumen:69

Página inicial: 014207-1 Página final: 014207-7 Indice de impacto: 2,962

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

1. Castillo, M; Herrero, V. J.; Méndez, I.; Tanarro, I.

Time resolved diagnostics and kinetic modelling of a modulated hollow cathode discharge of NO₂

Plasma Sourc. Sci. Tech.

Volumen: 13 Página inicial: 39

Página final: 47

Indice de impacto: 1,68

2. Tabarés, F.L.; Tafalla, D.; Tanarro, I.; Herrero, V. J.; Islyaikin, A. M.

Mass spectrometric studies of the mechanism of film inhibition in hydrogen/methane plasmas in the presence of nitrogen.

Vacuum

Volumen: 73

Página inicial: 161 Página final: 167

Indice de impacto: 0,61

3. Castillo, M., Herrero, V. J.; Méndez, I.; Tanarro, I.

Spectrometric and kinetic study of a modulated glow air discharge.

Plasma Sourc. Sci. Tech.

Volumen: 13

Página inicial: 343 Página final: 350

Indice de impacto: 1,68

4. Maté, B.; Ortega, I. K.; Moreno, M. A.; Escribano, R.; Fernández, D.; Herrero, V J. Investigation of orientation effects in films of nitric acid trihydrate

Phys. Chem. Chem. Phys

Volumen: 6

Página inicial: 4047. Página final:4055

Indice de impacto: 1,96

5. Ortega, I. K.; Escribano, R.; Fernández-Torre, D.; Herrero, V. J.; Maté, B.; Moreno M. A.

The HCl hexahydrate: RAIR spectra and theoretical investigation

Chem. Phys. Lett. Volumen: 396

Página inicial: 335 Página final:340

Indice de impacto: 2,44

6. Aoiz, F. J.; Verdasco, J. E.; Herrero, V. J.; Sáez Rábanos, V.

Stereodynamics of Ar+NO inelastic collisions

Phys. Chem. Chem. Phys. 6 (2004)

Volumen: 6

Página inicial: 4407

Página final:4415. Indice de impacto: 1,96

7. Escribano, R.; Ortega, I.K.; Mosteo, R.G. and Gómez, P.C.

The Br-o bond in alojen oxides-empirical force constants and electronic characteristies 1

Can. J. Chem.

Volumen: 82

Página Inicial: 998

Página final:1005

Indice de impacto: 1,055

8. Fernández-Torre, D.; Escribano, R.; Archer, T.; Pruneda, J.M. and Artacho, E. Firts-principles infrared spectrum of Nitric Acid and Nitric Acid Monohgdrate crystals

J. Phys. Chem. B Volumen: 108

Página Inicial: 10535 Página final: 10541

Indice de impacto: 3,679

9. Escribano, R.; Fernández-Torre, D. and Sloan, J.J.

Spectrochim. Acta, en imprenta

10. Bermejo, D. Canè, E. DiLonardo, G. Doménech, J.L., Escribano, R. Martínez, R and. Fusina, E.

The v_2 , v_3 and $2v_{10}$ Raman bands of ethylene ($^{12}C_2H_4$)

Mol. Phys. Volumen: 102

Página inicial: 1659 Página final:1669

Indice de impacto: 1,406

11. Boudon V.; Domenech J.L.; Bermejo D.; Willner H.

High-resolution Raman spectroscopy of the nu1 region and Raman-Raman double resonance spectroscopy of the 2nu₁-nu₁ band of ³²SF₆ and ³⁴SF₆. Determination of the equilibrium bond length of sulfur hexafluoride"

J. Mol. Spectrosc. Volumen:228

Página inicial: 392 Página final:400

Indice de impacto: 1,395

12. Domenech J.L.; Thibault F.; Bermejo D.; Bouanich J.P.

Ar-broadening of isotropic Raman lines in the v(2) band of acetylene

J. Mol. Spectrosc.

Volumen:225

Página inicial: 48 Página final:54

Indice de impacto:1,395

13. Avila, G.; Tejeda, G.; Fernández, J.M.; Montero, S.

The Raman Spectra and Cross sections of the v₂ band of H₂O, D₂O, and HDO J.Mol. Spectrosc.

Volumen: 223 (2)

Página inicial: 166 Página final: 180

Indice de impacto: 1,395

14. Graur, I.A.; Elizarova, T.G.; Ramos, A.; Tejeda, G.; Fernández, J.M.; Montero, S. A Study of Shock Waves in Expanding Flows on the Basis of Spectroscopic Experiments and Quasigasdynamic Equations

J. Fluid Mech. Volumen: 504

Página inicial: 239 Página final: 270

Indice de impacto: 1,811

15. Tejeda, G.; Fernández, J.M.; Montero, S.; Blume, D.; Toennies, J.P.

Raman Spectroscopy of Small para-H₂ Clusters Formed in Cryogenic Free Jets

Phys. Rev. Lett. Volumen: 92 (22)

Página inicial: 223401-1 Página final: 223401-4 Indice de impacto: 7,035 16. Ávila, G.; Fernández, J.M.; Tejeda, G.; Montero, S.

The Raman Spectra and Cross Sections of H₂O, D₂O, and HDO in the OH/OD Stretching Regions

J. Mol. Spectrosc. Volumen: 228 (1)

Página inicial: 38 Página final: 65

Indice de impacto: 1,395

17. Ortigoso, J.

Multiconfigurational pseudo-Hartree approach for the (t,t') propagator of a molecule

in short laser fields

Phys. Rev. A Volumen: 70

Página inicial: 55401-1 Página final: 055401-4

Indice de impacto: 2,589

18. Ortigoso, J.

Conservation of molecular alignment for cyclic rotational wave packets in periodic

pulse trains Phys. Rev. Lett.

Volumen: 93

Página inicial: 073001-1 Página final: 073001-4

Indice de impacto: 7,035

6.1.4 DPTO, DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

1. Cernicharo, J.; Guélin, M.; Pardo, J. R

Detection of the Linear Radical HC₄N in IRC +10216

The Astrophysical Journal, Volumen: 615, Issue 2,

Página inicial: L145 Página final: L148

Indice de impacto: 6,604

2. Pardo, J. R.; Cernicharo, J.; Goicoechea, J. R.; Phillips, T. G

The Slowly Expanding Envelope of CRL 618 Probed with HC₃N Rotational Ladres

The Astrophysical Journal

Volumen: Volume 615, Issue 1

Página inicial: 495 Página final: 505.

Indice de impacto: 6,604

3. Guélin, M.; Muller, S.; Cernicharo, J.; McCarthy, M. C.; Thaddeus, P.,

Detection of the SiNC radical in IRC+10216

Astronomy and Astrophysics

Volumen: 426, Página inicial: L49

Página final: L52

Indice de impacto: 3,843

4. Mauersberger, R.; Ott, U.; Henkel, C.; Cernicharo, J.; Gallino, R The abundance of ³⁶S in IRC+10216 and its production in the Galaxy

Astronomy and Astrophysics

Volumen: 426 Página inicial: 219

Página final: 227

Indice de impacto: 3,843

5. González-Alfonso, Eduardo; Smith, Howard A.; Fischer, Jacqueline;

Cernicharo, José

The Far-Infrared Spectrum of Arp 220

The Astrophysical Journal Volumen: 623, Sigue 1 Página inicial: 247

Página final: 261

Indice de impacto: 6,604

6. Figer, Donald F.; Najarro, Francisco; Kudritzki, Rolf P.

The Double-lined Spectrum of LBV 1806-20

The Astrophysical Journal Volumen: 610, Issue 2 Página inicial: L109

Página final: L112

Indice de impacto: 6,604

7. Pardo, J. R.; Wiedner, M. C.; Serabyn, E.; Wilson, C. D.; Cunningham, C.;

Hills, R. E.; Cernicharo, J

Side-by-Side Comparison of Fourier Transform Spectroscopy and Water Vapor Radiometry as Tools for the Calibration of Millimeter/Submillimeter Ground-based Observatorios

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 153, Sigue 1

Página inicial: 363 Página final: 367

Indice de impacto: 6,247

8. Goicoechea, Javier R.; Cernicharo, José; Masso, Helena; Senent, María Luisa A New Unidentified Far-Infrared Band in NGC 7027

The Astrophysical Journal Volumen: 609, Sigue 1

Página inicial: 225 Página final: 230

Indice de impacto: 6,604

9. Cernicharo, José

The Polymerization of Acetylene, Hydrogen Cyanide, and Carbon Chains in the Neutral Layers of Carbon-rich Proto-planetary Nebular

The Astrophysical Journal Volumen: 608, Issue 1 Página inicial: L41

Página final: L44

Indice de impacto: 6,604

10. Najarro, Francisco; Figer, Donald F.; Hillier, D. John; Kudritzki, Rolf P

Metallicity in the Galactic Center: The Arches Cluster

The Astrophysical Journal Volumen: 611, Issue 2 Página inicial: L105

Página final: L108

Indice de impacto: 6,604

11. Jiménez-Serra, I.; Martín-Pintado, J.; Rodríguez-Franco, A.; Marcelino, N. Tracing the Shock Procursors in the L1448, mm/IPS 3 Outflows.

Tracing the Shock Precursors in the L1448-mm/IRS 3 Outflows

The Astrophysical Journal Volumen: 603, Issue 1 Página inicial: L49

Página final: L52

Indice de impacto: 6,604

12. Goicoechea, Javier R.; Rodríguez-Fernández, Nemesio J.; Cernicharo, José The Far-Infrared Spectrum of the Sagittarius B2 Region: Extended Molecular Absorption, Photodissociation, and Photoionization

The Astrophysical Journal Volumen: 600, Issue 1

Página inicial: 214 Página final: 233

Indice de impacto: 6,604

13. Fuente, A.; Rodríguez-Franco, A.; Testi, L.; Natta, A.; Bachiller, R.; Neri, R Search for Circumstellar Disks Around Herbig Be Stara

Astrophysics and Space Science

Volumen: 292, Issue 1

Página inicial: 465 Página final: 468

Indice de impacto: 0,522

14. J.R. Pardo, J. Alcolea, V. Bujarrabal, F. Colomer, A. del Romero and P. de Vicente 28 Si= v = 1 and v = 2, J = 1-0 maser variability in evolved stars. Eleven years of short spaced monitoring

Astronomy and Astrophysics

Volumen: 424 Página inicial: 145

Página final: 156

Indice de impacto: 3,843

15. M. Wiedner, C. Prigent, J.R. Pardo, O. Nuissier, J-P. Chaboureau, J-P Pinty and P. Mascart,

Modeling of passive microwave responses in convective situations using output from mesoscale models: Comparison with TRMM/TMI satellite observations

Journal of geophysical research

Volumen: 109

Página inicial: D06214 Página final:

Indice de impacto: 2,992

16. L. Pagani, A. Bacmann, F. Motte, L. Cambresy, M. Fich, G. Lagache, M.-A Miville-Deschenes, J.R. Pardo and A.J. Apponi.

L183(L134N) Revisited II. The dust content

Astronomy and Astrophysics

Volumen: 417

Página inicial: 605 Página final: 613

Indice de impacto: 3,843

17.A.G. Csaszar, V. Salía, M.L. Senent

Ab initio torsional potencial and transition frequencies of acetaldehyde Journal of Chemical Physics,

Volumen: 120(3)

Página inicial: 1203 Página final: 1207

Indice de impacto: 2,950

18.M.L. Senent

Ab initio determination of the torsional spectrum of glycoaldehyde

Journal of Physical Chemitry A

Volumen: 108(3)

Página inicial: 6286 Página final: 6293

Indice de impacto: 2,792

19.M. Villa, L. Bounaim, N. Smeyers, M.L. Senent, E. Ezamarty, Y.G. Smeyers Ab initio structural study of some ibuprofen derivatives as posible anti-inflammatory agents

International Journal of Quantum Chemistry

Volumen: 97(4) Página inicial: 883

Página final: 888

Indice de impacto: 1,171

20. Errea, L. F.; Fernandez, L.; Macias, A.; Mendez, L.; Rabadan, I.; Riera. Sign-consistent dynamical couplings between *ab initio* three-center wave functions. Journal of Chemical Physics.

Volumen: 121

Página inicial: 1663

Página final: 1669

Indice de impacto: 2,950

21. Barragan, P.; Errea L.F.; Macias, A.; Mendez, L.; Rabadan, I.; Riera, A.; Lucas, J.M.; and Aguilar, A.

Study of *ab initio* molecular data for inelastic and reactive collisions involving the H₃⁺ supermolecule.

Journal of Chemical Physics.

Volumen: 121

Página inicial: 11629

Página final: 11638 Indice de impacto: 2,950

22. L. F. Errea, L. Fernandez, A. Macias, L. Mendez, I. Rabadan and A. Riera. Single and double electron capture in N⁵⁺+H₂ collisions at low impact energies. Physical Review. A

Volumen: 69

Página inicial: 012705-1

Página final: 12705-8 Indice de impacto: 2,589

23.Barragan, P.; Errea L.F.; Macias, A.; Mendez, L.; Rabadan, I.; Riera, A. State selective electron capture in collisions of ground and metastable N^{2+} ions with H(1s).

Physical Review. A

Volumen: 70

Página inicial: 022707-1

Página final: 022707-9 Indice de impacto: 2,589

24. Scarlata, C., Stiavelli, M., Hughes, M., Axon, D., Alonso-Herrero, A., et al. Nuclear Properties of a Sample of Nearby Spirals from STIS Imaging

Astronomical Journal

Volumen: 128

Página inicial: 1124 Página final: 1137 Indice de impacto: 5,647

25. Ivanov, V.D., Rieke, M. J., Engelbracht, C. W., Rieke, G. H., Alonso-Herrero, A., Luhman, K. L.

Medium Resolution Near-Infrared Spectral Library of Late Type Stars

Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 151

Página inicial: 387 Página final: 397

Indice de impacto: 6,247

26. Alonso-Herrero, A., Takagi, T., Baker, A., Rieke, G. H., Rieke, M., Scoville, N. Z. Obscured Star Formation in the Central Region of the Dwarf galaxy NGC5253

Astrophysical Journal

Volumen: 612

Página inicial: 222

Página final: 237

Indice de impacto: 6,247

27. Rieke, G. H. et al.

The Multiband Imaging Photometer for Spitzer (MIPS)

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 25

Página final: 29

Indice de impacto: 6,247

28. Huang, J.-S. et al.

Infrared Array Camera (IRAC) Imaging of the Lockman Hole

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 44

Página final: 47

Indice de impacto: 6,247

29. Papovich, C. et al.

The 24micron source counts in deep Spitzer Space Telescope surveys

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 70

Página final: 74

Indice de impacto: 6,247

30. Dole, H. et al.

Far-infrared Source Counts at 70 and 160 Microns in Spitzer Deep Surveys

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 87

Página final: 90

Indice de impacto: 6,247

31. Dole, H. et al.

Confusion of extragalactic sources in the mid and far-infrared: Spitzer and Beyond

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154 Página inicial: 93 Página final: 97

Indice de impacto: 6,247

32. Wilson, G. et al.

Extremely Red Objects in the Lockman Hole The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 107 Página final: 111

Indice de impacto: 6,247

33.Lagache, G. et al.

Polycyclic Aromatic Hydrocarbon contribution to the infrared output energy of the Universe at z=2

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 112 Página final: 116

Indice de impacto: 6,247

34. Serjeant, S. et al.

Submillimeter Detections of Spitzer Space Telescope galaxy populations

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 118 Página final: 122

Indice de impacto: 6,247

35. Ivison, R. et al.

Spitzer observations of MAMBO galaxies: weeding out active nuclei in starbursting ellipticals

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 124 Página final: 128

Indice de impacto: 6,247

36. Egami, E. et al.

Spitzer observations of the SCUBA/VLA sources in the Lockman Holes: star

formation history of luminous infrared galaxies The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 130 Página final: 134

Indice de impacto: 6,247

37. Alonso-Herrero, A. et al.

The nature of luminous X-ray sources with mid-infrared counterparts

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154 Página inicial: 155

Página final: 159

Indice de impacto: 6,247

38. Rigby, J. R. et al.

24 micron properties of X-ray selected active galactic nuclei

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 160 Página final: 164

Indice de impacto: 6,247

39. Le Floc'h, E. et al.

Identification of luminous infrared galaxies at 1<z<2.5

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 170 Página final: 174

Indice de impacto: 6,247

40. Gordon, K. D. et al.

Spatially resolved UV, H-alpha, infrared, and radio star formation in M81

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 215 Página final: 219

Indice de impacto: 6.247

41. Engelbracht, C. W. et al.

Far-infrared imaging of NGC55

The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 248 Página final: 252

Indice de impacto: 6,247

42. Helou, G. et al.

The anatomy of star formation in NGC300 The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154 Página inicial: 253

Página final: 257

Indice de impacto: 6,247

43. Hinz, J. L. et al.

Energy sources in the far-infrared emission of M33 The Astrophysical Journal Supplement Series

Volumen: 154

Página inicial: 259 Página final: 263

Indice de impacto: 6,247

44.Lípari, S, Díaz, R., Forte, J., Terlevich, R., Taniguchi, Y. Agüero, M., Alonso-Herrero, A., Mediavilla, E., Zept, S.

The nearest extreme starburst: bubbles, young star clusters, and outflow in the merger NGC3256

Monthly Notices Of The Royal Astronomical Society

Volumen: 424

Página inicial: L1 Página final: L6

Indice de impacto: 4,993

45. Imanishi, M. & Alonso-Herrero, A.

Near-infrared K-band spectroscopic investigation of Seyfert 2 nuclei in the CfA and 12micron sample

The Astrophysical Journal

Volumen: 614

Página inicial: 122

Página final: 134

Indice de impacto: 6,604

46. Kaaret, P., Alonso-Herrero, A., Gallagher, J. S., Fabbiano, G., Zezas, A., Rieke, M.

Displacement of X-ray sources from star clusters in starburst galaxies

Monthly Notices Of The Royal Astronomical Society

Volumen: 348

Página inicial: 28

Página final: 32

Indice de impacto: 4,992

47. L. Colina, S. Arribas, D. Clements

Integral field spectroscopy of the extended ionizad gas in Arp 220

Astrophysical Journal

Volumen: 602 Página inicial: 181

Página final: 189

Indice de impacto: 6,604

48. S. Arribas, H. Bushouse, R.A. Lucas, L. Colina, K. Borne

Optical imagins of very luminous infrared galaxy systems:Photometric properties and late evolution

Astronomical journal

Volumen: 127

Página inicial: 2522 Página final: 2543

Indice de impacto: 5,647

49. C. Packham, J. Radomsky, P. Roche, D.K. Aitken, A. Alonso-Herrero, L. Colina, C.

Telesco

The extended Mid-IR structure of the Circinus

Astrophysical Journal

Volumen: 618

Página inicial: L17 Página final: L20

Indice de impacto: 6,604

6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

1. Herrero, A.; Carmona, P.; Careche, M.

Raman spectroscopic study of structural changes in hake (Merluccius merluccius L.) muscle proteins during frozen storage.

Journal of Agricultural and Food Chemistry

Volumen: 52 (2004) Página inicial: 2147

Página final: 2153

Indice de impacto: 2,102

2. Carmona, P.; Monleón, E.; Monzón, M.; Badiola, J.J.; Monreal, J.

Título: Raman analysis of prion protein in blood cell membranes from naturally-

affected scrapie sheep Chemistry and Biology Volumen: 11 (2004).

Página inicial: 759 Página final: 764

Indice de impacto: 6,1.

3. I. Iriepa, F. J. Villasante, E. Gálvez, J. Bellanato, A. Martín y P. Gómez Sal, Synthesis, spectroscopic and crystallographic study of some carbamates from an azabicyclic chloroformate and primary heterocyclic amines

New Journal of Chemistry

Volumen: 28 (2004). Página inicial: 618

Página final: 624

Indice de impacto: 2,272

4. I. Iriepa, J. Bellanato, F. J. Villasante, E. Gálvez, A. Martín, y P. Gómez Sal. Synthesis, structural and crystallographic study of some carbamates derived from 9-methyl-9-azabicyclo[3.3.1]nonan-3α-ol

Journal of Molecular Structure

Volumen: 708 (2004). Página inicial: 117

Página final: 125

Indice de impacto: 1,021

5. de los Arcos, T.; Garnier, M. G.; Oelhafen, P.; Mathys, D.; Seo, J. W.; Domingo, C.; Garcia-Ramos, J. V.; Sanchez-Cortes S.

Strong influence of buffer layer type on carbon nanotube characteristics.

Carbon

Volumen: 42

Página inicial: 179

Página final: 182.

Indice de impacto: 3,12

6. Leyton, P.; Sánchez-Cortés, S.; García-Ramos, J. V.; Domingo, C.; Campos-Vallette, M.; Saitz C.; Clavijo, R. E.

Selective Molecular Recognition of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) on Calix[4]arene-functionalized Ag Nanoparticles by Surface-enhanced Raman Scattering.

Revista: Journal of Physical Chemistry B

Volumen: 108

Página inicial: 17484

Página final: 17490 Indice de impacto: 3,679

7. Cañamares, M. V.; García-Ramos, J. V.; Domingo, C.; Sánchez-Cortés Surface-enhanced Raman Scattering Study of the Adsorption of the Anthraquinone Pigment Alizarin Adsorption on Ag Nanoparticles.

Journal of Raman Spectroscopy.

Volumen: 35

Página inicial: 921

Página final: 927

Indice de impacto: 1,388

8. Sánchez-Cortés, S.; Marsal-Berenguer, R.; Pérez-Méndez, M. Adsorption of a Cholesteric Liquid-crystal Polyester on Silver Nanoparticles Studied by Surface-Enhanced Raman Scattering and Micro Raman Spectroscopy. Applied Spectroscopy.

Volumen: 58(5) Página inicial: 562

Página final: 569

Indice de impacto: 1,717

9. Fabriciova, G.; García-Ramos, J. V.; Sánchez-Cortés, S.; Miskovsky, P. Joint Application of Micro Raman and Surface-enhanced Raman Spectroscopy to the Interaction Study of Some Antitumoral Anthraquinone Drugs with Albumins. Journal of Raman Spectroscopy.

Volumen: 35

Página inicial: 384 Página final: 389

Indice de impacto: 1,388

10. Fabriciova, G.; García-Ramos, J. V.; Sánchez-Cortés, S.; Miskovsky Surface-enhanced Raman Spectroscopy Study of the Interaction of the Antitumoral Drug Emodin With Serum Human Albumin.

Biopolymers.

Volumen: 74(1-2) Página inicial: 125

Página final: 131

Indice de impacto: 2,733

11. Fabriciova, G.; García-Ramos, J. V.; Sánchez-Cortés, S.; Miskovsky, P. Adsorption and Acidic Behaviour of Anthraquinonic Drugs Quinizarin and Danthron on Ag Nanoparticles Studied by Raman Spectroscopy.

Vibrational Spectroscopy.

Volumen: 34(2)

Página inicial: 273 Página final: 281

Indice de impacto: 1,308

12. A. Flores, C. Martos, S. Sánchez-Cortés, F. Rubio, J. Rubio y J. L. Oteo Nanostructure and Micromechanical Properties of Silica/Silicon Oxycarbide Porous Composites.

Journal of the American Ceramic Society.

Volumen: 87(11)

Página inicial: 2093 Página final: 2100

Indice de impacto: 1,532

13. Aroca, R. F.; Ross, D. L.; Domingo, C.

Surface Enhanced Infrared Spectroscopy.

Applied Spectroscopy.

Volumen: 58(11)

Página inicial: 324A Página final: 338A

Indice de impacto: 1,717

14. Domingo, C.

Espectroscopía IR sobre nanosuperficies.

Óptica Pura y Aplicada.

Volumen: 37(2) Página inicial: 5

Página final: 16

15. García-Ramos, J. V.

Mecanismo Electromagnético del efecto SERS.

Óptica Pura y Aplicada.

Volumen: 37(2)

Página inicial: 17 Página final: 22

16. Sánchez-Cortés, S.

SERS en coloides.

Optica Pura y Aplicada.

Volumen: 37(2)

Página inicial: 35 Página final: 42

17. Murcia-Mascarós, S.; Domingo, C.; Cañamares, M. V.; Sánchez-Cortés, S.; García-Ramos, J. V.

Raman spectroscopic determination of organic red dyes by incorporation in Zr-Ormosil materials.

Coalition Newsletter.

Volumen: 8

Página inicial: 7 Página final: 11

18. Sánchez-Gil, J. A.; Maradudin, A. A.

Dynamic near-field calculations of surface-plasmon polariton pulses resonantly scattered at sub-micron metal defects

Optics Express Volumen: 12

Página inicial: 883 Página final: 894

Indice de impacto: 3,219

19.Gómez Rivas, J.; M. Kuttge, M.; Haring Bolivar, P.; Kurz, H.; Sánchez-Gil, J. A. Propagation of surface plasmon polaritons on semiconductor gratings Physical Review Letters

Volumen: 93

Página inicial: 256804-1 Página final: 256804-4

Indice de impacto: 7,035

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

1. Mina, M.F.; Ania, F.; Baltá Calleja, F.J.; Asano, T. Microhardness Studies of PMMA/Natural Rubber Blends

J. Appl. Polym. Sci., 91, 205-219(2004)

Indice de impacto: 1,017

2. Puente Orench, I.; Putthanarat, S.; Baltá Calleja, F.J.; Eby, R.K.; Morley Stone Ultra-microindentation at the surface of silk membranes Polymer, 45, 2041-2044(2004)

Indice de impacto: 2,340

3. Nguyen-Chung, T.; Mennig, G.; Boyanova, M.; Baltá Calleja, F.J.; Fakirov, S. Effect of an obstacle during processing on the weld line of injection-molded glassy polystyrene: Microhardness study

J. Appl. Polym. Sci., 92, 3362-3367 (2004)

Indice de impacto: 1,017

4. Cagiao, M.E.; Rueda, D.R.; Bayer, R.K.; Baltá Calleja, F.J. Structural changes of injection molded starch during heat treatment in water atmosphere: Simultaneous wide and small-angle x-ray scattering study J. Appl. Polym. Sci., 93, 301-309 (2004)

Indice de impacto:1,017

5. Baltá Calleja, F.J.; Flores, A.; Michler, G.H.

Microindentation Studies at the Near Surface of Glassy Polymers: Influence of Molecular Weight

J. Appl. Polym. Sci., 93, 1951-1956 (2004)

Indice de impacto:1,017

6. Puente Orench, I.; Ania, F.; Baer, E.; Hiltner, A.; Bernal, T.; Baltá Calleja, F.J. Basic aspects of microindentation in multi-layered PET/PC films Philosophical Magazine, 84(18), 1841-1852 (2004)

7. Baltá Calleja, F.J.; Cagiao, M.E.; Adhikari, R.; Michler, G.H.

Relating microhardness to morphology in styrene/butadiene block copolymer/polystyrene blends

Polymer, 45, 247-254 (2004)

Indice de impacto:2,340

8. Mina, M.F.; Ania, F.; Huy, T.A.; Michler, G.H.; Baltá Calleja, F.J. Micromechanical behavior and glass transition temperature of poly(methyl methacrylate) rubber blends

J. Macromol. Sci. Phys., B43, 947-961 (2004)

Indice de impacto:0,679

9. Mina, M.F.; Haque, M.E.; Baltá Calleja, F.J.; Asano, T.; Alam, M.M. Microhardness Studies of the Interphase Boundary in Rubber-softened Glassy Polymer Blends prepared with/without Compatibilizer

J. Macromol. Sci. Phys., B43, 1005-1014 (2004)

Indice de impacto:0,679

10. Henning, S.; Adhikari, R.; Michler, G.H.; Baltá Calleja. F.J.; Karger-Kocsis, J. Micromechanical Mechanisms for toughness enhancement in β-modified polypropylene Macromol. Symp., 214, 157-171 (2004)

Indice de impacto: 0,895

11. Zolotukhin, M.G.; Colquhoun, H.M.; Sestiaa, L.G.; Williams, D.J.; Rueda, D.R.; Flot, D.

Formation of crystalline macrocyclic phases during electrophilic precipitation—polycondensation syntheses of poly(arylene ether ketone)s Polymer, 45, 783-790 (2004)

Indice de impacto: 2,340

12. García Gutiérrez, M.C.; Alfonso, G.C.; Riekel, C.; Azzurri, F. Spatially Resolved Flow-Induced Crystallization Precursors in Isotactic Polystyrene by Simultaneous Small- and Wide-Angle X-ray Microdiffraction Macromolecules; 37(2), 478-485 (2004)

Indice de impacto: 3,621

13. García Gutiérrez, M.C.; Gourrier, A.; Riekel, C.

Investigation of Structural proceses During Indentation of Polymers by Synchrotron Radiation Microdiffraction

J. Macromol. Sci. Phys., 43(1), 267-277 (2004)

Indice de impacto: 0,679

14. García Gutiérrez, M.C.; Karger-Kocsis, J.; Riekel, C.

Stress oscillation-induced modular phase transformation and yielding in syndiotactic polypropylene

Chem. Phys. Lett., 398, 6-10 (2004)

Indice de impacto: 2,438

15. Alvarez, C.; Sics, I.; Nogales, A.; Denchev, Z.; Funari, S.S.; Ezquerra, T.A. Structure-dynamics relationship in crystallizing poly(ethylene terephthalate) as revealed by time-resolved X-ray and dielectric methods Polymer, 45, 3953-3959 (2004)

Indice de impacto: 2,340

16. Sanz, A.; Jiménez-Ruíz, M.; Nogales, A.; Martín y Marero, D.; Ezquerra, T.A. Hydrogen-bond network breakage as a first step to isopropanol crystallization Phys. Rev. Lett., 93, 15503 (2004)

Indice de impacto: 7,035

17. Nogales, A.; Thornley, S.A.; Mitchell, G.R.

Shear cell for in situ WAXS, SAXS, and SANS experiments on polymer melts under flow fields

J. Macromol. Sci. Phys., 43(6), 1161-1170 (2004)

Indice de impacto: 0,679

18. Capitán, M.J.; Rueda, D.R.; Ezquerra, T.A. Inhibition of the Crystallization in Nanofilms of Poly(3-hydroxybutyrate) Macromolecules, 37(15), 5653-5659 (2004)

Indice de impacto: 3,621

19. Alvarez, C.; Lozano, A.E.; Abajo, J. de; Campa, J.G. de la; Capitán, M.J.; Ezquerra, T.A.

Molecular structure-dynamics relationships in glassy poly(isophthalamide)s as revealed by wide angle X-ray scattering, dielectric loss spectroscopy and molecular modelling J. Chem Phys., 120(18), 8815-8823 (2004)

Indice de impacto: 2,950

20. Sanz, A.; Nogales, A.; Ezquerra, T.A.; Lotti, N.; Finelli, L. Cooperativity of the beta-relaxations in aromatic polymers Phys. Rev. E70(2), Art.No. 021502 Part 1 (2004)

Indice de impacto: 2,202

21. Nogales, A.; Broza, G.; Roslaniec, Z.; Schulte, K.; Sics, I.; Hsiao, B.S.; Sanz, A.; García Gutiérrez, M.C.; Rueda, D.R.; Domingo, C.; Ezquerra, T.A.

Low Percolation Threshold in Nanocomposites Based on Oxidized Single Wall Carbon Nanotubes and Poly(butylene terephthalate)

Macromolecules, 37(20), 7669-7672 (2004)

Indice de impacto: 3,621

22. Cruz, V.; Ramos, J.; Muñoz-Escalona, A.; Lafuente, P.; Peña, B.; Martínez-Salazar, J.

A 3D-QSAR study of metallocene catalysts for ethylene polymerization Polymer, 45, 2061-2072 (2004)

Indice de impacto: 2,340

23. Expósito, M.T.; Martínez, S.; Ramos, J.; Cruz, V.; Lopez, M.; Muñoz-Escalona, A.; Haider, N.; Martínez-Salazar, J.

Ethylene/styrene copolymerisation by homogeneous metallocene catalysts: experimental and molecular simulations using *rac*-ethylenebis(tetrahydroindenyl)MCl₂ [M=Ti,Zr] systems

Polymer, 45, 9029-9038 (2004)

Indice de impacto: 2,340

24. Aguilar, M.; Expósito, M.T.; Vega, J.F.; Muñoz-Escalona, A.; Martínez-Salazar, J. Elimination of extrudate distorsions in metallocene-catalyzed polyethylene Macromolecules, 37(3), 681-683

Indice de impacto: 3,621

25. Vega, J.F.; Rastogi, S.; Peters, G.W.M.; Meijer, H.E.H.

Rheology and Reptation of Linear Polymers. Ultra High Molecular Weight Chain Dynamics in the Melt

Journal of Rheology

Volumen: 48

Página inicial: 663 Página final: 678

Indice de impacto: 1,778

6.2 LIBROS Y MONOGRAFÍAS

6.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

1. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J. Título trabajo: Cylindrical Waves and Time Uncertainty in Perturbative and Non-Perturbative Quantum Gravity

Título del libro: Gravitational Radiation. Proceedings of the 27th Spanish Relativity Meeting

Editores: Miralles, J. A.; Font, J. A.; Pons, J. A. Editorial (país): Universidad de Alicante (España)

Páginas inicio: 53 Página final: 58

2. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J.

Título: Quantized Cylindrical Gravitational Waves and Microcausality

Título del libro: Gravitational Radiation. Proceedings of the 27th Spanish Relativity Meeting

Editores: Miralles, J. A.; Font, J. A.; Pons, J. A. Editorial (país): Universidad de Alicante (España)

Página Inicial: 201 Página final: 206

3. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J.

Título: Einstein-Rosen Waves and Microcausality

Título del libro: II Internacional Meeting on Lorentzian Geometry

Editores: Alías Linares, L. J.; Fernández Izquierdo, A.; Hernández Cifre, M. A.;

Lucas Saorín, P.; Pastor González, J.A.

Editorial (país): Publicaciones de la R.S.M.E. (España)

Página Inicial: 113 Página Final: 118

ISBN o ISSN: 84-933610-5-4

4. Barbero G., J. Fernando; Mena Marugán, Guillermo A.; S. Villaseñor, Eduardo J.

Título: Asymptotic Analysis of Quantum Light Cones for Cylindrical Gravitational Waves

Título del libro: Proceedings of the XII Fall Workshop on Geometry and Physics

Editores: Albuquerque, H.; Caseiro, R.; Clemente-Gallardo, J.; Nunes da Costa, J.M.

;Teles, J.

Editorial (país): Publicaciones de ls R.S.M.E. (España)

Página Inicial: 133 Página Final: 138

ISBN o ISSN: 84-933610-3-8

5. González, J.

Título: Electronic Properties of Carbon Nanotubes

Título del libro: Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology

Editores: Nalwa, H. S.

Editorial (país): American Scientific Publishers (USA)

Página Inicial: Vol. 3, 163 Página Final: 180

ISBN o ISSN: 1-58883-059-4

6.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

1. Moya de Guerra, E.; Sarriguren, P.; Álvarez-Rodríguez, R.; Escuderos, A.

Título trabajo: Spin-isospin excitations, pairing and shape coexistence

Título del libro: Symmetries in Nuclear Structure

Editores: A. Vitturi, R.F. Casten

Editorial (país): World Scientific, Singapur

Páginas inicio: 361 Página final: 366

ISBN o ISSN: 981-238-812-5

2. Fernández-Ramírez, C.; Moya de Guerra, E.; Udías, J.M.

Título trabajo: Pion Electro- and Photo-production on nuclei in a lagrangian

Approach

Título del libro: Electromagnetic induced two-hadon emission

Editores: A. Braghievi, C. Giusti, P. Grabmayr

Editorial (país): CD-ROM

Página Inicial: 234 Página Final: 239

ISBN o ISSN:8885159-20-6

3. Van Duppen, P.; Azaiez, F.; Blank, B.; de Angels, G.; Dobaczewski, J.; Emling, H.; Heyde, K.; Leino, M.; Moya de Guerra, E.; Warner, D.; Riisager, R.; Havakeh, M.N.

Título: Nuclear Structure

Título del libro: NuPECC Long Range Plan 2004: Perspectivas for Nuclear Physics

Research in Europe in the Coming Decade and Beyond

Editores: M Harakeh et al Editorial (país):ESF (Bruselas)

Página Inicial: 89 Página Final: 114

4. Sarriguren, P.

Título: Spin-isospin excitations in deformed nuclei from selfconsistent calculations

Título del libro: Horizons in World Physics vol. 245

Editores: T.V. Lynch

Editorial (país): Nova Science Publishers, USA

Página Inicial: 135 Página final: 187

ISBN o ISSN: 1-59454-063-2

5. Garrido, E.

Título: Three-body Resonances: Spectrum of Two Nucleon Halo Nuclei Título del libro: Proceedings of the 19th European Few-Body Conference

Editores: Ed. American Institute of Physics (AIP)

Editorial (país): Estados Unidos

Página Inicial: en prensa

6. Pittel, S. y Dukelsky, J.

Título: Some new perspectives on pairing in nuclei.

Título del libro: Symmetries in Nuclear Structure

Editores: A. Vitturi y R. F. Casten

Editorial (país): World Scientific, Singapur.

Páginas inicio: 72 Página final: 77

ISBN o ISSN: 981-238-812-5

7. Dukelsky, J.; Arias, J.M; García-Ramos, J.E. y Pittel, S.

Título: Integrability and quantum phase transitions in Interacting Boson Models.

Título del libro: Symmetries in Nuclear Structure

Editores: A. Vitturi y R. F. Casten

Editorial (país): World Scientific, Singapur.

Página Inicial 166 Página final: 171

ISBN o ISSN: : 981-238-812-5

8. Arias, J.M.; Alonso, C.E.; Vittury, A.; García-Ramos, J.E.; Dukelsky, J.; Frank, A

Título: The critical point symmetry E(5) and the IBM.

Título del libro: Symmetries in Nuclear Structure

Editores: A. Vitturi y R. F. Casten

Editorial (país): World Scientific, Singapur.

Página Inicial 201 Página final: 210

ISBN o ISSN: : 981-238-812-5

9. Dukelsky, J.; Esebbag, C.; Pittel, S.

Título: New Exactly Solvable Models of Interacting Bosons and Fermions.

Título del libro: Computational and Group-Theoretical Methods in Nuclear Physics

Editores: J. Escher, O. Castaños, J. G. Hirsch, S. Pittel y G. Stoitcheva

Editorial (país): World Scientific, Singapur

Página Inicial: 99 Página Final: 107

ISBN o ISSN:981-238-596-7

10. Dukelsky, J.; Gueorguiev, V.G.; Pittel, S.

Título: New generalizations of the Richardson-Gaudin models.

Título del libro: Nuclear Physics, Large and Small

Editores: R. Bijker, R. F. Casten y A. Frank.

Editorial (país): AIP Conference Proceedings, USA.

Página Inicial: 1 Página Final: 6

ISBN o ISSN: 0-7354-0207-8

11. Turrión, M.; Madurga, M.; Köster, U.; Gäggeler, H.; Jardin, P. et al.

Titulo: Release Measurements and Modelisation

Título del libro: Interdisciplinary TARGISOL. Winter School (CD)

Editores: Turrión, M.

Editorial (país): CERN (Suiza)

Páginas inicio: Página final:

ISBN o ISSN: ISBN 92-9083-235-5

6.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

1. Plusquellic D. F.; Korter, T.M.; Fraser, G.T.; Lavrich, R.J.; Benck, E.C.; Butcher, C.R.; Hightwalker, A.R; Domenech, J. L

Título trabajo: "Continuous wave Terahertz Spectroscopy of Plasmas and

Biomolecules"

Título del libro: Terahertz Sensing Technology. Vol 2: Emerging Scientific

Applications and Novel Device Concepts

Editores: Woolard, Dwight L.; Loerop, William R.; Shur, Michael S

Editorial (país): World Scientific Publishing Co (Singapore)

Páginas inicio: 385 Página final:404

ISBN o ISSN: 9812386114

6.3 TESIS DOCTORALES

6.3.3. DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Doctorando/a: Marco Castillo García

Título: "Espectrometría y cinética de plasmas fríos de óxidos de nitrógeno y aire".

Facultad y universidad: Ciencias Químicas, U. Complutense

Fecha de lectura y calificación: 19 de Noviembre de 2004, Sobresaliente cum Laude

Directores: Isabel Tanarro y Víctor J. Herrero

Doctorando/a: Gustavo Avila Blanco

Título: "Espectroscopía Raman de Rotación-Vibración de Algunas Moléculas de

Interés: H₂O, D₂O, HDO, (CO₂)₂ y (N₂)₂"

Facultad y universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid

Fecha de lectura y calificación: 9 junio, Sobresaliente "cum laude"

Director/a: Salvador Montero Martín

6.3.4. DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Doctorando/a: Ana Monreal Ibero

Título: Estudio Cinemático Y De Fuentes De Ionización De Galaxias Infrarrojas

Ultraluminosas Con Espectroscopia Bidimensional

Facultad y universidad: Ciencias Físicas, Universidad de La Laguna Fecha de lectura y calificación: julio 2004, sobresaliente cum laude

Director/a: L. Colina y S. Arribas

Doctorando/a: Andrés Asensio

Título: Transporte Radiativo En Líneas Moleculares. Aplicaciones En Astrofísica

Facultad y universidad: U.Laguna

Fecha de lectura y calificación: Julio 2004, sobresaliente cum laude

Director/a: J. Trujillo y J. Cernicharo

6.3.5. DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Doctorando/a: Ana Herrero Herranz.

Título: Cambios estructurales, físico-químicos y sensoriales en el músculo de pescado congelado. Evaluación de la calidad.

Facultad y universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha de lectura y calificación: 7-6-2004. Sobresaliente cum laude.

Director/a: Pedro Carmona y Mercedes Careche.

Doctorando/a: Jesús Gallego Nicasio.

Título: Influencia de la oxidación en la estructura de apoproteinas de LDL.

Facultad y universidad: Facultad de Ciencias Experimentales y de la Salud, Universidad

S. Pablo-CEU.

Fecha de lectura y calificación: 16-9-2004. Sobresaliente cum laude.

Director/a: Pedro Carmona y Mª Victoria Fraile.

6.3.6. DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Doctorando/a: Mohamed Chaouki El Fadel

Título: "Estudio de transformaciones estructurales en polímeros mediante susceptibilidad diamagnética: transiciones de fase y fenómenos de reorientación" Facultad y universidad: Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Fecha de lectura y calificación: 21-09-04; Sobresaliente "Cum laude"

Directores: Francisco J. Baltá Calleja y Fernando Ania

6.4. TESINAS DE LICENCIATURA

6.4.4. DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Tesinando/a: Izaskun Jiménez Serra

Título: Trazadores Moleculares de la Química en Flujos Bipolares

Facultad y universidad: Facultad de CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Fecha de lectura y calificación: mayo 2004, sobresaliente

Director/a: J. Martín-Pintado

Tesinando/a: José Pablo Fonfría Expósito

Título: Modelizado del espectro de IRC+10216 entre 11 y 14 um

Facultad y universidad: Facultad de CC. Físicas, Universidad Complutense de Madrid

Fecha de lectura y calificación: septiembre 2004, sobresaliente

Director/a: J Cernicharo

CAPÍTULO 7

RESUMEN NUMÉRICO DE LA LABOR REALIZADA

7.1 PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

ENTIDAD FINANCIADORA	
Unión Europea	12
Plan Nacional	28
Comunidades Autónomas	3
Otros	19
Total	62

7.2 COOPERACIÓN Y PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

	CONGRESOS Y REUNIONES		
	Ponencias	Comunicaciones	Posters
Nacionales	6	4	18
Internacionales	55	18	31
Total	61	22	49

ACTIVIDAD DOCENTE			
Cursos de doctorando	5		
Cursos de Alta especialización	5		
Seminarios	15		
Total	25		

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA			
Trabajos publicados en revistas	162		
Obras colectivas y monografías	13		
Tesis doctorales presentadas	5		
Tesinas de licenciatura	2		