

MEMORIA DE ACTIVIDADES 2005

1.4 DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACION

1.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Jefe del Departamento: Dr. José González Carmona

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Dr. José González Carmona
Dr. Jesús Fernando Barbero González
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. Luis Javier Garay Elizondo
Dr. Eduardo J. Sánchez Villaseñor
Dr. Jerónimo A. Cortez Quezada
Dr. José María Martín García
Dr. Enrico Perfecto
D. David Brizuela Cieza
D. Pablo Galán Sánchez
D. Iñaki Garay Elizondo
D. Gil Jannes

Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Becario Postdoctoral
Doctor Contratado I3P
Becario Postdoctoral
Becario Predoctoral
Becario I3P de postgrado
Becario Predoctoral
Becario I3P de postgrado

1.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y ESTADÍSTICA

Jefe del Departamento: Dra. M^a José García Borge

Investigadora Científica

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Prof. Javier Bermejo Barrera
Prof. Elvira Moya Valgañón (E. Moya de Guerra)
Dr. Jorge Dukelsky Berkovich
Dr. Olof Eric Tengblad
Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dr. Carlos Esebbach Benchimol
Dr. Luis Mario Fraile Prieto
Dr. Carlos Cabrillo García
Dr. Ricardo Fernández Perea
Dra. Manuela Turrión Nieves
D. Ibón Bustinduy Uriarte
Dña. Raquel Álvarez Rodríguez
D. Rafik Boutami
D. Diego Escrig Forano
D. César Fernández Ramírez
D. Miguel Madurga Flores
Dña. Aranzazu Maira Vidal
D. Adolfo Sabán Iglesias
Dña. Beatriz Errea Subero
D. Oscar Moreno Díaz
D. Martín Alcorta Moreno
Dr. Sergio Adrián Lerma Hernández

Profesor de Investigación
Profesora de Investigación
Investigador Científico
Investigador Científico
Investigador Científico
Científico Titular
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigadora Contratada I3P
Becario Predoctoral
Becaria Predoctoral
Becario Postdoctoral

1.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Jefe del Departamento: Dr. Julio Francisco Santos Gómez Científico Titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza
Prof. Salvador Montero Martín
Dra. Concepción Domingo Maroto
Dr. Rafael Escribano Torres
Dr. Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dr. José Luis Doménech Martínez
Dr. José María Fernández Sánchez
Dra. Belén Maté Naya
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dr. Julio Santos Gómez
Dr. Raúl Z. Martínez Torres
Dr. Ángel Ramos Gallardo
Dña Delia Fernández Torre
Dña Laura Gómez Martín
D. Juan Hernández Morilla
D. Ismael Keneth Ortega Colomer
Dña Beatriz Martín Llorente
Dña Isabel Méndez Sánchez

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Investigadora Científica
Investigador Científico
Investigador Científico
Investigadora Científica
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado I3P
Investigador Contratado Juan de la Cierva
Becaria Predoctoral
Becaria Predoctoral
Becario Predoctoral
Becario Predoctoral
Becaria Predoctoral
Becaria Predoctoral

Personal de apoyo:

Dr. Guzmán Tejada Gala
D. José Manuel Castillo de Pedro
D. Miguel Ángel Moreno Alba
Dña. Amelia Velo Gómez
D. José Luis Martínez Sanmartín

Titulado Superior
Ayudante Diplomado de Investigación
Ayudante de Investigación
Contratado I3P
Contratado I3P

1.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Jefe del Departamento: Prof. José Cernicharo Quintanilla Profesor de Investigación

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Prof. Jesús Martín-Pintado Martín
Dra. Maria Luisa Senent Diez
Dr. Luis Colina Robledo
Dr. Francisco Najarro De La Parra
Dr. Juan Ramón Pardo-Carrión
Dra. Almudena Alonso Herrero
Dr. Arturo Rodríguez Franco
Dra. Rosa Domínguez Gomez
D. Javier Corrales Garcia
D. Fernando Martín Jimenez
D. Manuel Sanchez Renedo
Dña. Laura Diez Merino
D. David Teyssier
Dña. Izaskun Jimenez Serra
D. José Pablo Fonfria Exposito
D. Miguel Angel Requena Torres

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación
Investigadora Científica
Científico Titular
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigadora Contratada (Ramón y Cajal)
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Titulado Superior Contratado
Titulado Superior Contratado
Titulado Medio de Invest. y Lab. contratado
Titulado Superior Contrato I3P
Titulado Superior Contratado
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral FPI

Dña. Macarena García Marín
D. Marcelino Agundez Chico
Dña. Helena Masso González
Dña. Belén Tercero Martínez
D. Tanio Díaz Santos
Dña. Arancha Amo Baladrón
D. Fabien Daniel

Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral MAE

Personal de apoyo:

Dña. Alicia Fernández Clavero

Ayudante de Investigación

1.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Jefe del Departamento: Dra. Magna Santos Greve

Científico titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Prof. Juana Bellanato Fontecha
Prof. José Vicente García Ramos
Dr. Pedro Carmona Hernández
Dr. Luís Díaz Sol
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dra. M^a Aranzazu Rodríguez Casado
Dra. Marina Molina Santos
Dr. Juan Alberto Torresano Escobosa
Dña. M^a Vega Cañameres Arribas
D. Bousseham Samoudi
D. Vincenzo Giannini
D. Luca Guerrini
Dña. Zuzana Jurasekova

Prof. Inv. (vinculada "ad honorem")
Profesor de investigación
Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado I3P (desde 16/3/04)
Doctora Vinculada
Doctor Vinculado
Becaria Predoctoral
Becario Predoctoral
Becario Predoctoral
Becario Predoctoral (desde 01/01/2005)
Becaria Predoctoral (desde 16/05/2005)

Personal de apoyo:

Dña. María Luisa López Gil
D. Raimundo Villar Martínez
Dña. Raquel Ambrona Sanchez

Ayudante de Investigación
Auxiliar Administrativo (hasta 30/10/05)
Auxiliar Administrativo (desde 02/11/05)

1.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del Departamento: Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Prof. Francisco José Baltá Calleja
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana
Dr. Daniel R. Rueda Bravo
Dr. Fernando Ania García
Dra. María Esperanza Caglio Escotado
Dra. María José Capitán Aranda
Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat
Dr. Víctor Cruz Cañas
Dra. M^a Cruz García Gutiérrez
Dra. Aurora Nogales Ruíz
Dr. Juan Francisco Vega Borrego
Dr. Rudiger K. Bayer

Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Investigador Científico
Científico Titular
Científica Titular
Científica Titular
Científica Titular
Científico Titular
Investigadora Contratada
Investigadora Contratada
Investigador Contratado
Sabático (MEC)

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
Dña. M^a Teresa Expósito Espinosa
D. Jaime Javier Hernández Rueda
Dña. Sandra Martín Rauseo
Dña. Sonia Martínez Hedo
Dña. Inés Puente Orench
D. Alejandro Sanz Parras

Becario Postdoctoral
Becaria Predoctoral
Becario (UE)
Becaria Predoctoral
Becaria Predoctoral
Becaria Predoctoral
Becario Predoctoral

Personal de apoyo:

Dr. José Carlos Canalda Cámara
Dña. Ana M. Montero Cuéllar

Titulado Superior Especializado
Ayudante de Investigación

Capítulo 2

LABOR INVESTIGADORA

2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Electrones Correlacionados; Gravitación.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Propiedades electrónicas de nanotubos de carbono y grafito.
- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos Computacionales en Física Gravitacional.
- Agujeros Negros y Análogos en Materia Condensada.

TÉCNICAS UTILIZADAS

- Física Teórica y Matemática; Métodos Computacionales.

LABOR INVESTIGADORA:

Gravitación: cosmología cuántica, cuantización de ondas gravitatorias y agujeros negros.

Durante el año 2005 se ha continuado trabajando con éxito en las líneas ya tradicionales del grupo en gravitación y cosmología: cuantización de reducciones de simetría con dos vectores de Killing de relatividad general (ondas de Einstein-Rosen, modelos de Gowdy y de Schmidt), límites de resolución espaciotemporal, horizontes aislados y dinámicos, temas de relatividad numérica y análogos de agujeros negros en materia condensada.

Por lo que respecta al primer punto el trabajo desarrollado para ondas de Einstein-Rosen se ha centrado preferentemente en el acoplo de campos de materia, específicamente, campos escalares sin masa. La incorporación de materia a estos modelos es una forma de enriquecerlos y aumentar su potencial físico, entre otras razones, porque así es posible contar con sondas externas que permitan extraer conclusiones de manera operacional sobre las consecuencias de haber cuantizado la geometría espacio-temporal. El hecho no trivial de que sea posible conseguirlo sin dejar de tener un modelo tratable

de manera exacta en sus regímenes clásico y cuántico es un avance destacable en este campo que está siendo explotado en la actualidad.

En el área de la cosmología cuántica, nuestro trabajo se ha centrado en el llamado modelo de Gowdy T3, que describe soluciones cosmológicas con inhomogeneidades. Los intentos anteriores de otros grupos para obtener una descripción cuántica del modelo habían fracasado, porque conducían a una evolución no unitaria (con producción infinita de partículas en el vacío). Analizamos en detalle la dinámica del modelo y construimos una descripción cuántica en la que se solucionaban los problemas. Así, se ha conseguido por primera vez una cuantización consistente de un sistema cosmológico con inhomogeneidades (es decir, una teoría de cosmología cuántica de campos), compatible con la interpretación probabilística convencional de la mecánica cuántica. En la actualidad, estamos investigando las consecuencias de este formalismo cuántico.

En lo referente al estudio de los límites de resolución temporales y espaciales debidos a la presencia conjunta de efectos cuánticos y gravitatorios, nuestra investigación se ha centrado en las llamadas teorías de relatividad doblemente especial, en las que las leyes de dispersión usuales se ven modificadas para permitir la existencia de una escala invariante de energía o momento (por ejemplo, la escala de Planck). En este contexto, hemos mostrado que existen teorías donde se puede alcanzar una resolución temporal ilimitada cuando se realiza una descripción cuántica no perturbativa de las mediciones. Éste es el primer ejemplo contra la creencia de que es inevitable una incertidumbre espaciotemporal mínima en gravedad cuántica. Además, hemos conseguido identificar dominios de validez para distintos tipos de incertidumbres espaciotemporales que habían sido propuestas en la literatura.

Nuestro trabajo en Relatividad Numérica se ha centrado en dos frentes diferentes. Por un lado se ha continuado el análisis de las posibles formulaciones hiperbólicas de las ecuaciones de Einstein, intentando optimizar su eficiencia en las simulaciones numéricas. Una de las técnicas sugeridas por nosotros este año (llamada "constraint damping") ha logrado estabilizar por primera vez la evolución de binarias de agujeros negros (recientes simulaciones de Frans Pretorius), lo cual ha supuesto un enorme avance en la resolución del problema más importante en Relatividad Numérica, y de gran relevancia en Astrofísica. Por otro lado, se ha seguido desarrollando el entorno de cálculo tensorial algebraico xTensor, con el que estamos actualmente abordando varios problemas que requieren cálculo muy intensivo, entre ellos teoría de perturbaciones de alto orden en Relatividad General, o el tratamiento de polinomios del tensor de curvatura.

Finalmente, en lo concerniente al tema de análogos de agujeros negros en física de la materia condensada, hemos examinado el comportamiento de condensados de Bose-Einstein con una densidad y perfil de velocidad que permiten la presencia de un horizonte acústico. En particular, hemos analizado las inestabilidades dinámicas y estudiado cómo se relacionan con la existencia real de horizontes acústicos. Para simplificar el estudio, hemos considerado perfiles unidimensionales que son uniformes a trozos, bien con una o dos discontinuidades de tipo escalón. Este caso idealizado contiene toda la información relevante para el análisis de perfiles de mayor complejidad.

Superconductividad en nanotubos de carbono y grafito.

Durante el año 2005 se ha investigado teóricamente la existencia de superconductividad en estructuras formadas por muchas capas concéntricas de nanotubos de carbono. Durante hace ya tiempo, los así llamados nanotubos multicapa han despertado gran interés debido a diversos efectos notables en sus propiedades de conducción (interferencia de ondas de electrón, transporte balístico, etc.). En este último año, un grupo de investigadores japoneses (J. Haruyama y colaboradores) ha realizado las primeras observaciones de lo que parecen ser transiciones a un estado superconductor en nanotubos multicapa, con temperaturas críticas en torno a 12 K, aproximadamente 25 veces por encima de las medidas en manojos de nanotubos. En estos experimentos los nanotubos han sido sintetizados en los poros de una matriz de óxido de aluminio, constatándose que la observación de la superconductividad resulta ser muy sensible al número de capas que son contactadas por los electrodos en los extremos de la matriz.

Tomando como guía dichos experimentos, se ha procedido a la construcción de un marco teórico incorporando todos los factores relevantes para el transporte en los nanotubos multicapa. En particular, se ha considerado en detalle cada una de las componentes de la interacción electrón-electrón dentro de cada nanotubo individual, para discernir si el balance entre la repulsión de Coulomb y la interacción atractiva mediada por el intercambio de fonones puede ser favorable a la formación de pares de Cooper y desarrollo de correlaciones superconductoras. En el análisis teórico se ha distinguido entre lo que son propiedades de los nanotubos de carbono individuales y los efectos característicos que aparecen al considerar la interacción entre las diferentes capas concéntricas. En este sentido, el acoplo electrostático entre capas es un efecto importante pues tiende a apantallar de manera efectiva la repulsión de Coulomb dentro de cada nanotubo. Todavía más importante es que la transmisión de pares de Cooper por efecto túnel entre nanotubos vecinos permita abrir la coherencia tridimensional necesaria para la formación de todo estado superconductor. Teniendo en cuenta estos factores, se ha propuesto un modelo teórico que predice la aparición de transiciones superconductoras en nanotubos multicapa, para escalas de temperatura que son consistentes con las observadas experimentalmente. El estudio de dicho modelo ha permitido determinar el diagrama de fases del sistema electrónico, en función del número de capas metálicas de la estructura y del dopado.

El mismo marco teórico está siendo también empleado para describir el mecanismo de la superconductividad en grafito convenientemente dopado, entendiendo su estructura de láminas como el caso límite de un nanotubo multicapa cuando el radio se hace infinitamente grande. Se sabe desde hace ya tiempo que los compuestos intercalados de grafito, con átomos de elementos metálicos actuando como dopantes, son superconductores con temperaturas críticas que van desde la escala de 0.1 K hasta la de los 10 K. El hecho de que la escala superior de estas temperaturas sea comparable a la que se ha observado ahora en los nanotubos multicapa abre la perspectiva de que exista un marco común para la superconductividad de las diferentes estructuras de láminas de carbono. Otras investigaciones realizadas este último año han puesto de relieve que la curvatura de los nanotubos no juega un papel determinante en el desarrollo de las correlaciones superconductoras, y que en ello es más importante el número de canales (número de subbandas y de capas metálicas) que pueden estar abiertos para el transporte y deslocalización de los pares de Cooper. La investigación permitirá determinar, en definitiva, cuáles son los factores clave que posibilitan la formación del estado

superconductor, con el propósito de indicar las condiciones experimentales óptimas para la consecución de mayores temperaturas de transición en el conjunto de los materiales de carbono.

2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Cálculos de gran escala en sistemas fermiónicos finitos. Transiciones de fase cuánticas. Modelos exactamente solubles.
- Estructura y reacciones con núcleos estables y exóticos.
- Sistemas de tres cuerpos en física nuclear
- Estructura y dinámica microscópica de la materia condensada desordenada o nanoestructurada. Desarrollo de instrumentación avanzada para espectroscopía neutrónica. Algoritmos para visualización de datos masivos en espectroscopía neutrónica.
- 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. I+D en detectores y electrónica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad. Modelos de Richardson-Gaudin.
- Estudio de transiciones Gamow-Teller relevantes en Estructura Nuclear, Astrofísica y Física de Partículas. Desintegración beta simple y doble.
- Dispersión de electrones por núcleos. Observables de polarización. Superscaling en dispersión inclusiva.
- Núcleos con halo
- Resonancias en sistemas de tres cuerpos
- Funciones de onda del continuo
- I+D para FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research)
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas
- Estudio de las propiedades estructurales y dinámicas de núcleos con halo

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Técnicas de diagonalización a gran escala. Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. Representación de álgebras de Lie.
- Métodos de cálculo de campo medio autoconsistente.
- Dispersión de Neutrones. Relajación de Espín muónico. Espectroscopia Dieléctrica. Simulación numérica.
- Coincidencias gamma-gamma, detección de partículas cargadas
- 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.

LABOR INVESTIGADORA:

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 tener una 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. Los primeros resultados obtenidos para el núcleo ^{48}Cr confirman la validez del procedimiento DMRG para el estudio de espectros de baja energía.

Por otro lado, hemos comenzado el desarrollo de un nuevo procedimiento DMRG para el tratamiento de hamiltonianos no hermíticos en el marco del modelo de capas de Gamow. Este nuevo método nos permitirá tratar núcleos livianos con fuerte acoplamiento al continuo, sus estados ligados, resonancias y propiedades de desintegración.

Modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos de muchos cuerpos:

Durante el año 2005 realizamos avances significativos 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. Hemos estudiado el comportamiento de estas ecuaciones en las regiones críticas reduciéndolas a un problema libre de divergencias. De esta manera, es posible calcular los valores críticos de los acoplamientos y resolver las ecuaciones modificadas en un entorno de la región crítica. Este desarrollo implica un nuevo paso en el desarrollo de un procedimiento para la solución numérica de las ecuaciones de RG para sistemas con un gran número de fermiones.

Los modelos de RG se basan en las 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 isovectorial, mostrando resultados numéricos para el núcleo ^{64}Ge en espacios de valencia con dimensiones mucho mayores de las que pueden ser tratadas con grande diagonalizaciones. Esta nueva línea de trabajo se continuará con el estudio de modelos $so(3,2)$ para dos especies bosónicas y $su(4)$ para superconductividad de alta temperatura.

El ansatz de RG describe en forma única la estructura de un sistema superconductor o superfluido en términos de pares correlacionados que se comportan como resonancias en la región de acoplamiento débil o BCS o como estados moleculares cuasi ligados en la región de acoplamiento fuerte o BEC. El estudio de un hamiltoniano de pairing en el límite termodinámico nos permitió definir la naturaleza del par de Cooper en el medio superconductor, su evolución hacia un estado molecular como función de la intensidad de la interacción y la fracción del condensado en una forma mas consistente que la usualmente utilizada a partir de la matriz densidad de dos cuerpos.

Deformación nuclear, desintegración β y doble desintegración β

Prosiguiendo con el estudio de las distribuciones energéticas de Gamow-Teller (GT) y las vidas medias de desintegración beta mediante un formalismo teórico 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 QRPA, hemos abordado diferentes problemas de interés en Estructura Nuclear, Astrofísica Nuclear y Física de Partículas. En particular, hemos estudiado las vidas medias de desintegración beta en los isótopos exóticos con $N=Z$ y $N=Z+2$ denominados waiting points. La importancia de estos núcleos radica en que sus vidas medias determinan el flujo de los procesos de nucleosíntesis rp (captura rápida de protones), paralizando estos procesos hasta que una relativamente lenta desintegración beta se produce. Estas propiedades son necesarias para entender procesos los explosivos en sistemas binarios tipo X-ray bursts. Hemos mostrado la capacidad de nuestro formalismo para reproducir la información experimental existente y por tanto para utilizarse con poder predictivo para estimar vidas medias de núcleos para los que no existe información experimental.

El proceso de doble desintegración beta es uno de los experimentos clásicos propuestos como test del Modelo Standard. La existencia de una doble desintegración beta sin emisión de neutrinos sería un proceso que violaría la conservación del número leptónico e implicaría que el neutrino es una partícula de Majorana masiva. Junto a este proceso prohibido por el Modelo Standard existe otro permitido y de hecho observado que consiste en la doble desintegración beta con emisión de dos neutrinos. Dado que la contribución de la estructura nuclear en ambos procesos es similar, el primer paso a realizar es describir el proceso observado de la manera más precisa posible. Nuestros cálculos de doble desintegración beta con emisión de dos neutrinos 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 en estos procesos. 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.

Hemos estudiado también las transiciones de tipo Fermi y la mezcla de isospín en cadenas isotópicas de Kr alrededor de $N=Z$ considerando distintas aproximaciones que parten de una base tipo Hartree-Fock. Se estudian los efectos de Coulomb, de pairing y de correlaciones tipo RPA en las transiciones prohibidas de Fermi y en la mezcla de isospín en el estado fundamental observando que las correlaciones de pairing incrementan notablemente las mezclas de isospín y de manera más acusada en los

núcleos $N=Z$.

Dispersión de electrones y núcleos exóticos

Las ventajas de utilizar sondas leptónicas como herramienta para extraer información sobre la estructura nuclear son de largo conocidas y estas ventajas son igualmente aplicables a la estructura electromagnética de núcleos exóticos de la que poco se sabe. Hemos comenzado a calcular estas propiedades mediante distintos modelos de estructura nuclear con el objeto de predecir una serie de observables que puedan ser contrastados experimentalmente en un futuro próximo. Así, se han calculado los factores de forma para núcleos inestables ricos en neutrones en un gran rango de masas que incluyen isótopos de He, Li, Ni, Kr y Sn. Las densidades de carga y masa se obtienen a partir de cálculos microscópicos de capas en el caso de núcleos ligeros y de campo medio autoconsistente en el caso de núcleos intermedios y pesados. Los factores de forma de carga se calculan con y sin distorsión coulombiana. Con todo ello, se han realizado predicciones sobre la influencia del número creciente de neutrones en observables que pueden ser medidos experimentalmente mediante dispersión de electrones por núcleos exóticos en la nueva generación de experimentos planeados en GSI y RIKEN.

Hemos estudiado las funciones de scaling y superscaling 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. Este modelo permite estudiar simultáneamente el papel desempeñado por la densidad local y por la distribución de momentos en la descripción de los fenómenos de scaling y superscaling en núcleos. Los cálculos muestran que las componentes de alto momento en CDFM y su similitud para diferentes núcleos describen el superscaling experimentalmente observado en núcleos desde Helio hasta Plomo, incluso en las regiones de la variable de scaling donde el modelo de Fermi fracasa.

La fotoproducción de piones es un proceso clásico dentro de la Física Nuclear y de Partículas empleado para el estudio de las resonancias nucleónicas y la interacción nucleón-pión. Este estudio proporciona información sobre la deformación del nucleón así como sobre su influencia en el medio nuclear. Se ha desarrollado un modelo para estos procesos que mejora los existentes estableciendo de una manera rigurosa e innovadora las resonancias nucleónicas hasta masas de 1.7 GeV.

Sistemas de tres partículas: Resonancias, estructura y modos de desintegración

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 hiperarmónicos esféricos proporciona una herramienta muy potente para estudiar los estados en el continuo en sistemas de tres partículas.

Con este procedimiento hemos continuado la investigación iniciada el año anterior sobre las características de las resonancias de un sistema de tres cuerpos, haciendo especial énfasis en sus modos de desintegración, en particular en la distribución de energía de los fragmentos resultantes de dicha desintegración.

Este método ha sido aplicado a la investigación de los estados resonantes de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$, por lo que se refiere a la dripline de neutrones, y ${}^{17}\text{Ne}$ en la dripline de protones. Una ventaja adicional del método es que es también aplicable cuando la interacción Coulombiana interviene en el sistema (${}^{17}\text{Ne}$ por ejemplo), permitiendo investigar un sistema como el constituido por tres partículas alfa, a través del cual se pueden estudiar los estados resonantes del ${}^{12}\text{C}$, de gran interés por las implicaciones que puede tener en los procesos de nucleosíntesis estelar. El problema de Coulomb en sistemas de tres partículas es uno de los frentes que está abierto desde hace años, y en el cual diversos grupos están hoy en día trabajando de forma intensa.

Caracterización de estados nucleares relevantes en procesos de núcleo-síntesis estelar

Previamente hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados. En las memorias de 2003 y 2004 informábamos del estudio en cinemática completa de las tres alfas provenientes de niveles de ${}^{12}\text{C}$ poblados a partir de la desintegración β^+ de ${}^{12}\text{N}$ y β^- de ${}^{12}\text{B}$. Así se puso fin a la controversia sobre el mecanismo de ruptura del nivel a 12.71 MeV y la mejora del sistema experimental, diseñada en nuestro laboratorio, 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). Estos resultados afectan al ritmo de la reacción de triple alfa en el escenario estelar aumentando al doble la velocidad de fusión de 3α en estrellas primordiales ($T < 10^8\text{K}$) y reduciendo la velocidad de formación de elementos pesados en la supernova ($T > 10^9\text{K}$) (Nature 433 (2005) 136).

Continuando en la misma línea hemos estudiado los niveles excitados de baja energía de ${}^9\text{Be}$ relevantes en el cálculo de la reacción ${}^4\text{He}(\alpha n, \gamma){}^9\text{Be}$ en el escenario estelar. Es ésta una de las reacciones clave en el medio rico en neutrones, pues junto con la reacción ${}^9\text{Be}(\alpha, n){}^{12}\text{C}$ compite con la reacción triple alfa para producir elementos intermedios y pesados mediante el proceso-r en explosiones de supernova y proceso-s en estrellas AGB (Asymptotic Giant Branch). Desde el punto de vista de estructura nuclear es un gran reto para los experimentadores completar el conocimiento de la estructura excitada de núcleos ligeros ahora que existen cálculos “exactos” ab-initio para núcleos con $A < 12$. Esta tarea no es fácil debido a que la mayoría de los niveles son resonancias anchas que se rompen con la emisión de múltiple partículas a través de distintos canales. En nuestros estudios de cinemática completa hemos identificado la contribución de un nuevo estado ancho a 5 MeV. Las correlaciones angulares nos han permitido asignar el spin a este estado en ${}^9\text{Be}$ y otros para los que no había ninguna evidencia experimental (Phys. Lett B618(2005)43). Además tenemos nuevos datos para profundizar en el mecanismo de ruptura del nivel de 2.43 MeV a $n\alpha\alpha$ que se interpreta en la bibliografía como secuencial a través de ${}^8\text{Be}$ o en ruptura directa sin pasar por ninguna resonancia binaria. Este trabajo se completará con la comparación de los patrones de desintegración de ${}^9\text{Li}$ a ${}^9\text{Be}$ y del núcleo con halo ${}^{11}\text{Li}$ (${}^9\text{Li} + \text{halo}$) a ${}^{11}\text{Be}$ para los que se esperan patrones de desintegración equivalente si la función de onda del estado fundamental del ${}^{11}\text{Li}$ se puede factorizar en sus dos partes core + halo (tesis de M. Madurga).

Como complemento a estos trabajos hemos estudiado la reacción ${}^{10}\text{B} + {}^3\text{He}$ cuyos canales a través de ${}^{12}\text{C}$ y ${}^9\text{B}$ nos dan información sobre estados no accesibles a la

desintegración beta complementando la información sobre la estructura de estos núcleos. Este trabajo ha constituido el primer experimento realizado en la línea de Física Nuclear instalada en el Tandetrón del CMAM. El análisis de los datos constituye el trabajo de investigación para el DEA de M. Alcorta.

Búsqueda de correlaciones octupolares en ^{231}Ac

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 ^{231}Ac poblada en la desintegración beta de ^{231}Ra . Este análisis constituye una parte substancial de la tesis de R. Boutami ya que la estructura excitada de este núcleo era desconocida. Estudios de coincidencias $\beta\gamma\gamma$, $\beta\gamma e^-$ han permitido establecer un esquema de niveles para ^{231}Ac que incluye treinta niveles hasta una energía de excitación de 1.3 MeV. Utilizando la técnica de “fast timing” $\beta\gamma\gamma(t)$ 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 ^{231}Ac indican que son, en media, dos órdenes de magnitud más lentas que en núcleos de deformación permanente como es ^{227}Ra . Podemos concluir, de este estudio espectroscópico, que en ^{231}Ac 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) finalizó el 31 de octubre 2005 y tenía como objetivo la optimización de las propiedades de extracción de elementos químicos en blancos radioactivos de tipo ISOL (separador de isótopos on-line). La base de datos ORACLE diseñada y desarrollada en el proyecto es accesible vía web a través de la URL: <http://www.targisol.csic.es>. Además, gracias a la página web desarrollada, el usuario puede diseñar y ensayar distintos blancos con geometrías sencillas, ejecutándose un Monte Carlo de simulación directamente desde la página web y así determinar cual es la geometría y composición de blanco más adecuada para la producción y extracción del núcleo de interés.

I+D en Detectores para Física Nuclear Experimental

Se han seguido dos líneas de trabajo independientes aunque relacionadas: la primera, ligada al proyecto EURONS (EU Contract nº 506065) consiste en el diseño del sistema que nos permita la digitalización temprana de las señales de detectores de partículas cargadas obviando la electrónica intermedia y así evitar las limitaciones que esta conlleva. Se está estudiando la viabilidad de identificar las diferentes partículas mediante un análisis de la señal digital con redes neuronales artificiales. La segunda línea de trabajo, enmarcada dentro de la colaboración FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), consiste en el diseño de un detector de protones y rayos gamma con

alta resolución tanto en energía como en ángulo. Para cumplir con las especificaciones definidas para este proyecto, se han realizado simulaciones del comportamiento materiales centelladores LYSO (Prelude-420) y $\text{LaBr}_3(\text{Ce})$ (Brilliance-380) de nueva generación. Paralelamente se han montado prototipos con los que llevar a cabo pruebas de caracterización y respuesta de los mismos.

Desarrollo de Métodos de Manipulación y Visualización 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 utilizar 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 en un espectrómetro TOF de última generación.

Estudio de Excitaciones Elementales en Materia Desordenada

Dos han sido las líneas principales desarrolladas durante el pasado año en este aspecto relativas a las excitaciones colectivas en líquidos. Por un lado, hemos estudiado el efecto sobre el comportamiento de las excitaciones colectivas de términos direccionales (anisótropos) en los potenciales de interacción. Por otro, el efecto inducido por confinamiento a escalas nanoscópicas sobre las excitaciones colectivas en un líquido con interacciones isotrópicas pero con fuerte carácter cuántico: el deuterio líquido.

En lo que respecta al efecto de términos direccionales en el potencial hemos podido demostrar experimentalmente mediante dispersión inelástica de neutrones como la estructura de las excitaciones del Galio líquido, en contra de lo que se ha sugerido en trabajos previos, no puede ser explicada en su totalidad en términos de ondas de densidad "acústicas" (movimientos atómicos en fase) tal y como se esperaría de un líquido simple (esto es, con potenciales de interacción entre pares isotropos) si no que aparecen también movimiento colectivos con un carácter "óptico" (en contra-fase). El origen microscópico de tal comportamiento estaría en el comportamiento complejo de los enlaces atómicos para este semi-metal en los que no sólo actuarían enlaces de tipo metálico sino también enlaces covalentes. Así mismo, se estudiaron las excitaciones colectivas, de nuevo mediante la técnica de dispersión inelástica de neutrones de un líquido molecular sencillo fuertemente mediatizado por enlaces de puente de hidrógeno: el ácido fluorídrico (en su versión deuterada, DF). Se constató la existencia de excitaciones colectivas no dispersivas claramente diferenciadas (no sobre-amortiguadas) de tipo óptico. Se confirmarían así predicciones anteriores basadas en estudios numéricos sobre la existencia de este tipo de excitaciones en líquidos y que corresponderían a remanentes de determinados modos ópticos de la fase cristalina relacionados con estructuras moleculares en cadena.

En cuanto al deuterio líquido, de nuevo utilizando la técnica de dispersión de neutrones inelástica, se estudiaron las excitaciones colectivas de éste bajo condiciones de confinamiento. Como medio confinador se usaron estructuras MCM-41 de SiO₂ con un tamaño de poro de unos 2.4 nm cuyo comportamiento de llenado se caracterizó mediante la medida de las correspondientes isotermas de adsorción. Las medidas se realizaron en condiciones de llenado capilar completo pero dentro del rango correspondiente a presiones negativas. Contrariamente a lo observado para el caso del He en circunstancias similares, la dinámica microscópica se ve fuertemente influenciada por el confinamiento de forma tal que, mientras que los movimientos difusivos aparecen fuertemente ralentizados, las excitaciones colectivas muestran una clara disminución de la vida media junto con un claro desplazamiento hacia energías más altas.

Estructura y dinámica de nanotubos de carbono

Durante el pasado año hemos podido desarrollar un modelo teórico continuo de la dinámica de los nanotubos de carbono más allá de los modelos al uso actuales que estarían dentro de la aproximación de espesor diferencial de los nanotubos. Se ha podido comprobar así que es necesario un espesor finito en los modelos si se quiere reproducir la distribución de modos previstas por los cálculos "ab initio" lo que de hecho se consigue hasta frecuencias sorprendentemente altas. Complementariamente, se ha podido ver que, a pesar de los recientes avances en este sentido, los cálculos "ab initio" no son todavía fiables en lo que respecta a los modos de frecuencia más baja. Estos modelos teóricos sencillos permitirán un análisis simplificado de los estudios experimentales concomitantes sobre la dinámica microscópica de nanotubos en interacción.

Se pudo también demostrar experimentalmente mediante difracción de neutrones la influencia de la historia térmica sobre la propensión de las muestras de nanotubos a auto-organizarse en haces cristalinos 2D. Se constató sí, como en nanotubos generados mediante un arco de descarga un flujo continuo de la atmósfera inerte que los rodea promueve fuertemente la formación de los haces frente al caso de una atmósfera estática.

2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Física Molecular
- Fluodinámica Molecular
- Espectroscopía Laser
- Física Molecular Teórica



"Láser de excitación en el Laboratorio de Fluidodinámica Molecular"

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Físico-química de la atmósfera. Espectroscopia IR de hielos de interés atmosférico
- Físico-química de la atmósfera. Generación de plasmas fríos de aire a bajas presiones y estudio de mecanismos relevantes en la cinética de las capas inferiores (D y E) de la ionosfera
- Aplicaciones de plasmas fríos al desarrollo de recubrimientos y técnicas de inhibición de películas hidrogenadas para dispositivos de fusión
- Dinámica y cinética de reacciones químicas y de procesos de transferencia de energía
- Espectroscopia Raman en chorro supersónico
- Agregados de hidrógeno molecular
- Transferencia energía R-T en colisiones moleculares inelásticas
- Espectroscopia láser molecular de alta resolución
- Obtención de parámetros espectroscópicos de moléculas de relevancia en procesos atmosféricos
- Control Cuántico Molecular
- Alineamiento y orientación molecular
- Espectroscopia molecular teórica

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopia IR de transmisión y absorción-reflexión. Cálculos de primeros

- principios de sólidos cristalinos.
- Reactores de descarga. Espectrometría de masas de iones y neutros. Espectroscopia de emisión. Sondas de Langmuir. Microbalanza. Cálculos cinéticos.
- Haces moleculares supersónicos. Espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI). Cálculos dinámicos
- Espectroscopia Raman Lineal. Chorros supersónicos. Criogenia.
- Espectroscopia Raman-inverso, doble resonancia Raman-Raman
- Simulación numérica

LABOR INVESTIGADORA:

Físico-química de la atmósfera. Espectroscopia 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 (HNO_3 , HCl , y otros previstos) adsorbidos en distintos grados de hidratación, así como mezclas ternarias de los mismos. Hemos realizado cálculos con el programa de cálculo teórico de estructuras periódicas SIESTA (acrónimo de Spanish Initiative 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. Asimismo se ha iniciado un proyecto de cálculos ab initio, en colaboración con el Prof. Pedro Gómez de la U. Complutense, sobre las posibles estructuras ternarias de moléculas de agua, ácido nítrico y ácido clorhídrico, con el fin de estudiar los tipos de enlace que pueden ocurrir entre estas moléculas en los cristales ternarios atmosféricos. Estos cálculos se llevan a cabo con el programa Gaussian 2003.

Dentro de la parte experimental se han continuado los estudios de espectroscopia RAIR de capas de diversos “hielos”. Se ha puesto a punto el montaje para obtener espectros de transmisión de estas muestras, y por primera vez hemos podido registrar espectros de transmisión de láminas finas de diversos hidratos de ácido nítrico cristalino. Estas medidas pueden complementar las obtenidas por absorción-reflexión para la determinación de los índices ópticos de las muestras. En concreto, hemos finalizado y enviado a publicar un estudio sobre el dihidrato (NAD) en el que se verifica la existencia de efectos de orientación en el crecimiento de estos cristales.

Dentro del estudio de especies ternarias, hemos llevado a cabo medidas de cristales de NAT (ácido nítrico trihidratado) sometidos a una exposición de HCl , en distintas condiciones de presión y temperatura. Las principales conclusiones, enviadas a publicar, indican que el HCl se adsorbe sobre el sustrato de NAT a bajas temperaturas ($<100\text{K}$) y se disocia y penetra la red cristalina del trihidrato a mayores temperaturas. Los efectos se multiplican si existe exceso de agua en la muestra, lo que representaría condiciones más próximas a las atmosféricas.

En estas líneas de trabajo teórico y experimental, 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/fmap/main.htm>

Este tema de trabajo ha dado lugar en el año 2005 a una serie de publicaciones, que se mencionan también en la citada página web, y más adelante en esta Memoria.

Es importante destacar que en el año 2005 se ha adquirido un nuevo espectrómetro de infrarrojo por transformada de Fourier, modelo Bruker Vertex 70, que servirá de base a las medidas a realizar por este grupo de trabajo, compartido con otros grupos de investigación del Instituto.

Físico-química de la atmósfera. Generación de plasmas fríos de aire a bajas presiones y estudio de mecanismos relevantes en la cinética de las capas inferiores (D y E) de la ionosfera

El trabajo se centra en la generación de plasmas fríos de aire a bajas presiones, puros y con trazas de otras sustancias en estado de vapor, a fin de reproducir en el laboratorio, en condiciones controladas, algunos de los conjuntos de mecanismos más relevantes en la cinética de las capas inferiores (D y E) de la ionosfera. El estudio de tales mecanismos se realiza mediante la caracterización espectrométrica de las especies neutras y eléctricamente cargadas producidas, unido a la simulación teórica de los resultados obtenidos con modelos cinéticos elaborados para tal fin y la comparación con los datos bibliográficos existentes. En este marco de trabajo, se han estudiado, en un reactor de descarga en cátodo hueco, los plasmas de aire generados en un rango de presiones comprendidas entre 0.003 y 0.05 mbar, y se ha observado la formación de NO neutro en concentraciones que llegan a ser similares a las del O₂, así como el predominio de NO⁺ entre las especies iónicas. Esta especie iónica está presente también en concentraciones muy significativas en las capas inferiores de la Ionosfera terrestre. Partiendo del modelo cinético elaborado previamente por nosotros para la caracterización de especies neutras en plasmas de óxidos de nitrógeno, y ampliándolo convenientemente a fin de incluir los iones, ha sido posible reproducir satisfactoriamente los resultados experimentales y explicar los mecanismos más significativos, tanto en fase homogénea como heterogénea, así como la interacción entre la química de iones y de especies neutras.

Aplicaciones de plasmas fríos al desarrollo de recubrimientos y técnicas de inhibición de películas hidrogenadas para dispositivos de fusión

En los actuales reactores experimentales de fusión termonuclear, basados en isótopos del hidrógeno, las regiones existentes entre el plasma caliente confinado magnéticamente y las superficies de primera pared se hallan ocupadas por plasmas a baja temperatura, capaces de provocar importantes fenómenos de interacción plasma-pared (sputtering físico y químico y redeposición de material) de gran relevancia para el contenido energético del plasma de fusión, la integridad de los materiales de los reactores a largo plazo y la eliminación del tritio. Debido a ello, la investigación de estos procesos en plasmas fríos en descargas de laboratorio y el desarrollo de métodos específicos para controlarlos resulta de gran interés; incrementado en los últimos tiempos ante la inminente construcción del reactor internacional de fusión ITER.

Con esta orientación, durante este año hemos generado mediante descargas continuas de cátodo hueco plasmas fríos de H₂ en el rango de presiones de interés para los reactores de fusión (en torno a 0.01 mbar), y hemos detectado las concentraciones absolutas, tanto del hidrógeno atómico resultante de la disociación del H₂, como de las especies iónicas

H^+ , H_2^+ y H_3^+ ; encontrando una fuerte variación de la proporción entre estas últimas con la presión. También hemos elaborado un modelo cinético para comparar los resultados experimentales con las predicciones teóricas, encontrándose un satisfactorio acuerdo entre ambos, lo que ha permitido comprobar la relevancia de los diferentes mecanismos involucrados.

Dinámica y cinética de reacciones químicas y de procesos de transferencia de energía .

Se ha realizado un trabajo exhaustivo de revisión de los avances recientes en el estudio de la reacción prototípica $H+H_2$ y de sus variantes deuteradas que sirve de modelo a buena parte de las innovaciones en la teoría de reacciones químicas en fase gaseosa. En este trabajo se destaca el progreso de la última década que ha permitido obtener un acuerdo casi cuantitativo entre las medidas experimentales más refinadas y las predicciones teóricas. Se señalan las controversias más importantes que aún subsisten. Especialmente en la identificación de efectos cuánticos como resonancias, interferencias o influencia de la fase geométrica y se indican líneas de trabajo incipientes como el estudio de la reactividad a baja temperatura y la reactividad en estados de Rydberg. Algunos de los aspectos controvertidos serán objeto de estudio de nuestro grupo en el próximo futuro.

Se ha llevado a cabo un estudio, clásico y cuántico, sobre la reactividad del sistema $N(^2D)+H_2$ y variantes deuteradas en función de la rotación inicial. Mientras que los resultados clásicos muestran un efecto apreciable, similar al observado previamente para la reacción $F+H_2$, los cálculos cuánticos, basados en un reciente modelo estadístico, no predicen apenas dependencia de la reactividad de $N(^2D)+H_2$ con la excitación rotacional de la molécula de hidrógeno. Por el momento no existen datos experimentales que resuelvan la discrepancia.

Se han continuado también los estudios sobre colisiones inelásticas. En concreto se ha estudiado teóricamente (cálculos clásicos y cuánticos) el sistema $Ne+NO$ que constituye un interesante caso intermedio entre el $Ar+NO$ estudiado previamente en nuestro grupo con importantes interacciones atractivas, y el $He+NO$ donde las interacciones atractivas son muy pequeñas pero en el que aparecen interesantes efectos derivados de la asimetría del potencial. También se ha continuado el estudio experimental de la relajación rotacional de CO a muy baja temperatura ($T < 30$ K) en colisiones con H_2 .

Fluidodinámica molecular

Se ha seguido trabajando en la determinación experimental de los coeficientes de transferencia nivel-a-nivel ($k_{i \rightarrow j}$) para colisiones inelásticas rotacionales de interés astrofísico, a partir de las medidas de espectros Raman en chorros supersónicos de gases. En esta línea, se ha diseñado e instalado un nuevo sistema para medir de forma más directa las presiones en tobera de expansiones de gases, así como la presión residual en cámara, empleando un manómetro de alta precisión MKS Baratron. Este nuevo sistema nos ha permitido aumentar la precisión de las medidas absolutas de densidad, imprescindible para obtener valores fiables de los coeficientes de transferencia.

Se ha caracterizado el comportamiento real de las toberas de 313 y 50 micras, empleadas en los experimentos de expansiones de gases, mediante la medida precisa del flujo másico y la presión en tobera. El coeficiente de descarga (razón entre el flujo másico real y el teórico) así obtenido para cada tobera, frente al número de Reynolds (Re) resulta independiente de la naturaleza del gas, en un intervalo de Re de casi tres órdenes de magnitud.

Se han medido nuevas series de expansiones de nitrógeno puro, hidrógeno normal, y diversas mezclas de orto- y para-hidrógeno en distintas proporciones, para determinar los coeficientes de transferencia colisionales de nitrógeno, orto-hidrógeno y mixtos orto/para-hidrógeno. También se han medido varias series de expansiones de mezclas de para-hidrógeno con He en distintas proporciones, para determinar los coeficientes de transferencia colisionales de para-hidrógeno:He. Los resultados de todas estas medidas están actualmente en fase de elaboración.

En cuanto al estudio de agregados pequeños de para-hidrógeno en expansiones criogénicas, se ha mejorado el diseño de las toberas criogénicas, eliminando superficies y mejorando el contacto entre tobera y criostato, lo que ha permitido alcanzar una temperatura mínima en tobera de 20 K.

Finalmente, se ha probado un sistema de estabilización de la frecuencia del láser de Ar+ monomodo mediante anclado a una transición del yodo. Para ello se ha construido un prototipo basado en absorción en célula de I₂ a muy baja presión, y un control mediante un programa de ordenador, con lo que se ha conseguido una estabilidad en la frecuencia de 0.001 cm⁻¹. Ello permitirá emplear con éxito una segunda célula de yodo para filtrar el scattering elástico, y poder registrar espectros Raman a muy baja frecuencia.

Espectroscopía láser de alta resolución. Obtención de parámetros espectroscópicos de moléculas de relevancia en procesos atmosféricos

Se ha continuado el estudio mediante espectroscopía Raman-inverso de diferentes bandas de la molécula de hexafluoruro de azufre (SF₆), en sus isotopólogos con ³²S y ³⁴S. Esta molécula, con un GWM (Global Warming Potential) 24000 veces superior al CO₂, aumenta su tasa de concentración atmosférica a un ritmo del 7 % anual, y su vida media en la atmósfera se estima en 3200 años. Pese a ser esencial para realizar medidas cuantitativas en la atmósfera, la espectroscopía de esta molécula es insuficientemente conocida. La absorción responsable de su intenso efecto invernadero está en la zona de la banda ν_3 hacia 948 cm⁻¹, pero sólo el nivel $\nu_3=1$, está bien determinado. Sin embargo en esta zona existen numerosas bandas calientes y de combinación originadas en estados distintos del fundamental (a temperatura ambiente sólo el 30 % de las moléculas se hallan en este estado), que no se hallan bien caracterizados debido a su inaccesibilidad mediante transiciones de dipolo eléctrico. Las técnicas Raman aportan una información insustituible sobre estos estados vibracionales. Durante este año se ha concluido el registro y análisis de las bandas $2\nu_6$ de ³²SF₆ y ³⁴SF₆ y ν_2 y ν_5 de ³⁴SF₆.

También se han medido y se han analizado los coeficientes de ensanchamiento por presión del nitrógeno en mezclas N₂-H₂ en función de la temperatura. La importancia de estas medidas radica en la necesidad de datos precisos para la determinación remota de temperaturas en medios atmosféricos y de combustión. Para ello se han registrado mediante la técnica de espectroscopía Raman inversa los perfiles de la banda

fundamental de vibración del N₂ con resolución rotacional, autoperturbado y en mezclas con H₂ a presiones entre 20 y 1000 mbar y temperaturas entre 77 K y 300 K. Posteriormente estos perfiles han sido ajustados a modelos de forma de línea, para extraer los parámetros de ensanchamiento colisional, prestando especial atención al problema que plantea separar la señal proveniente del N₂ atmosférico fuera de la célula de muestra. Paralelamente, en colaboración con la universidad de Franco-Condado, se han llevado a cabo cálculos utilizando el modelo semiclásico de Robert-Bonamy para temperaturas entre 77 K y 500 K. Ajustando el diámetro cinético en estos cálculos se ha obtenido un buen acuerdo con las medidas existentes, y en la actualidad trabajamos en la extensión de las medidas a altas temperaturas.

Control Cuántico Molecular. Alineamiento y orientación molecular. Espectroscopía molecular teórica

Durante este año se ha profundizado en los estudios de alineamiento y orientación molecular con campos externos. Hemos demostrado teóricamente la posibilidad de mantener durante un tiempo arbitrario una fuerte orientación para moléculas con momento dipolar muy pequeño. Nuestro método se basa en la creación de paquetes de ondas cíclicas, que posteriormente son sometidos a la combinación de un tren de pulsos láser de elevada intensidad y un campo electrostático débil. Hemos demostrado que los estados cíclicos pueden crearse mediante la interrupción súbita de un láser adiabático de larga duración. Basándonos en estos hallazgos hemos diseñado un esquema de control que permite eliminar el campo estático sin deteriorar la orientación molecular. De esta manera podría conseguirse una elevada orientación, para moléculas prácticamente no polares, en ausencia de campos externos (para los intervalos temporales entre los pulsos láser).

Se ha investigado la relación entre los estados cíclicos para un tren de pulsos láser y los estados pendulares para un campo láser de onda continua de igual intensidad promedio. Esto nos ha permitido caracterizar el rango de parámetros del tren de pulsos –intensidad, anchura y frecuencia de repetición– que permiten mantener alineamiento y orientación muy altos para una molécula dada. Se ha investigado asimismo el efecto de modificar la amplitud y la fase en el espectro del pulso.

Se han obtenido resultados preliminares satisfactorios acerca de las posibilidades de control cuántico de los estados cíclicos, mediante pulsos de control adicionales de distintos tipos que se superponen al tren de pulsos que los mantiene estables.

Se ha iniciado una nueva línea de investigación que pretende trasladar nuestra experiencia en el control de procesos moleculares en fase gaseosa a moléculas situadas en superficies. Para ello es necesario caracterizar adecuadamente la interacción molécula-superficie, para a continuación diseñar campos externos apropiados que permitan orientar moléculas de forma controlada sobre la superficie.

2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

Astrofísica Molecular e Infrarroja

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Medio Interestelar
- Formación Estelar
- Transferencia de Radiación
- Química del Medio Interestelar y Circunestelar galáctico y extragaláctico
- Estudio de núcleos activos de galaxias
- Dinámica y cinemática de galaxias
- Química Teórica aplicada a la Astrofísica
- Espectroscopia de Estrellas Masivas
- Transmisión de ondas electromagnéticas en la atmósfera terrestre

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Instrumentos: Plataformas espaciales con instrumentación Infrarroja, Radiotelescopios, Telescopios Ópticos
- Métodos: Transferencia de radiación, procesos químicos, espectroscopía en el espacio

LABOR INVESTIGADORA:

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, con contribución japonesa. Consistirá de 50 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.

JWST es un proyecto de las agencias espaciales americanas (NASA), europea (ESA), con la participación de la agencia espacial canadiense y diversos países europeos. El JWST será un telescopio de 6.5 metros de diámetro que operará a temperaturas

criogénicas de 35 K en el rango espectral de entre 1 y 28 micras, y trabajará al límite de difracción con una sensibilidad órdenes de magnitud superior a la de los grandes telescopios terrestres. Los objetivos científicos fundamentales son la detección de los objetos de primera luz en el Universo, la formación y evolución de galaxias, y el estudio de discos protoplanetarios. El DAMIR está involucrado en el instrumento MIRI (Mid-IR Instrument) como miembro del consorcio de grupos europeos que lidera el diseño y construcción del instrumento.

Los nuevos instrumentos 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 físico-químicas 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 fisico-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 son:

- 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 H_2O , 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 , H_2O , HCN , CN con H_2 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 rotacionales.

- 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 pérdida 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 (C_4H , C_5H , C_6H , C_7H , C_8H , ...), y de los procesos químicos que las hacen intervenir en la formación de grandes macromoléculas.

- Estudio de la emisión máser de HCN, SiO, H_2O , 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 ro-vibracionales.

- 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 (H_2 , CO, HCN, H_2O) y, hasta ahora, la zona de interfase entre la atmósfera estelar y dicha envoltura ha sido pobremente tratada. Esta tarea está íntimamente 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 físico-químicos 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 difícilmente 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 de incluir un área de Estructura Molecular Teórica.

Galaxias y cosmología observacional

El grupo extragaláctico de DAMIR está 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 póster los resultados de los análisis.

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

Como estudio preliminar el becario Tanio Diaz bajo la supervisión de Almudena Alonso y de Luis Colina ha realizado un estudio detallado de la formación estelar en la LIRG NGC7469. Esta galaxia contienen un núcleo AGN en su centro así como un anillo de formación estelar con un diámetro de aproximadamente 1kpc; el AGN y el anillo de formación 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 número de regiones (probablemente cúmulos estelares y/o regiones HII). El objetivo fundamental de este estudio es caracterizar las propiedades (edad, masa, extinción) de estas regiones individuales de formación estelar del anillo, ver cual es su contribución a la luminosidad total del anillo, y en general a la luminosidad bolométrica del sistema. Para ello se están utilizando imágenes con la mayor resolución espacial posible del HST así 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 continúa sus trabajos como miembro 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 Supplement 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 óptico, 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 también 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 demostrado que más de un 50% de ellos, a pesar de contener un AGN brillante tienen distribuciones espectrales de energía dominadas por emisión estelar lo cual podría indicar que la formación estelar es también responsable de una gran parte de la luminosidad infrarroja y volumétrica de estos objetos.

Las principales líneas de investigación del DAMIR en el año 2005 en el campo de la Astrofísica han sido las siguientes:

- Química del medio circunestelar.
- Regiones HII.
- Transferencia de radiación en el centro de nuestra galaxia (emisión en el IR lejano de OH).
- Determinación de la abundancia de H_2O en el centro galáctico a partir de observaciones en el IR lejano.
- 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 espectroscopía óptica 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 2005 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 H_2 (CO , H_2O) 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- H_2 , concretamente los iones (en estados metaestables) C^{2+} , N^{2+} , O^{2+} , 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- H_2 , y de la relación con el formalismo IOSA, empezando con el caso $H^+ + H_2$ en que se encuentran discrepancias entre los resultados experimentales y los resultados de la aproximación súbita. Estudio de la reacción $H_2^+ + H$.

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 no-rígidas. 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 autoconsistentemente 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 roto-vibracionales de las moléculas de glicolaldehído 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 (SiNH_2 , HNSiH , NSiH_2). También se están estudiado pequeñas cadenas hidrocarbonadas (C_4) 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 excitados metaestables H_2 en que la anisotropía del blanco es importante.

Procesos de intercambio de carga entre iones multicargados y H_2 , D_2 , DT , T_2 a estados vibracionales específicos y para distintos estados vibracionales del canal de entrada.

CONTRIBUCIÓN AL DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN INTERNACIONAL

Atacama Large Millimeter Array (ALMA)

- Continuación del 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.
- Contrato de desarrollo de software para ALMA

En la fase actual de desarrollo del Atacama Large Millimeter Array (ALMA), el aspecto del software de calibración y simulación es el principal campo de trabajo del DAMIR. El objetivo es explorar con más detalle las posibilidades de la interferometría submilimétrica teniendo en cuenta el impacto de factores externos (atmósfera, contaminación por señales artificiales, y efectos instrumentales) con miras a dotar al

sistema de ALMA con las herramientas necesarias para abordar en tiempo real las correcciones que se precisen. Para ello se han desarrollado en el DAMIR un conjunto de librerías en el marco del software oficial del proyecto cuyos objetivos son la simulación directa de la absorción y cambios de fase en la señal introducidos por la atmósfera, y el desarrollo de toda una serie de algoritmos que permitan su predicción a partir de observables obtenidos por sistemas de patrullaje atmosférico previstos para el observatorio (radiómetros de vapor de agua, espectrómetros de transformada de Fourier, radiómetros de temperatura, etc...). En 2005 éste trabajo ha sido realizado por Juan Ramón Pardo al 50% de su tiempo, bajo contrato firmado por el IEM con ESO (European Southern Observatory). El estado actual de este trabajo puede consultarse en <http://damir.iem.csic.es/PARDO/ATMCP/HTML>.

- 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 satélite Herschel

- Desarrollo de herramientas para la reconstrucción de mapas de la emisión molecular a gran escala realizados con la técnica de cartografía rápida.
- Desarrollo de herramientas para la visualización y análisis de datos de cubos obtenidos con HIFI y con interferométricos .
- 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 Instrument (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
- Diseño detallado del simulador criogénico MTS
- Participación en el grupo científico
- Participación en el grupo de verificación y calibración

GESTIÓN DE PROYECTOS INTERNACIONALES:

J. Cernicharo: Miembro español en el European ALMA Scientific Advisory Committee (ESAC) y en el ALMA Scientific Advisory Committee (ASAC).

J. Cernicharo : Miembro del panel "Astrofísica y Astropartículas" de ESFRI (UE).

J. Cernicharo : Representante Español en el European ALMA Board y en el ALMA Board (hasta Noviembre de 2004).

J. Cernicharo : Coordinador de los grupos Europa/USA para la preparación de la Ciencia de Herschel

J. Cernicharo : Mission Scientist de Herschel.

J. Martín-Pintado: Responsable de la coordinación y gestión de la contribución del MEC a ALMA. Representante español en el ALMA Board desde Noviembre del 2004

J. Martín-Pintado: Miembro del Comité de Dirección del instrumento HIFI de Herschel

J. Martín-Pintado: Responsable de la contribución del CSIC al ICC del HIFI (Herschel).

Luis Colina : Coinvestigador principal europeo del instrumento de infrarrojo medio (MIRI) del James Webb Space Telescope (JWST, NASA/ESA).

Luis Colina : coordinador de la participación científica española en MIRI Contribución al desarrollo de instrumentación internacional

Francisco Najarro: Representante español en ESI (European Spica Instrument), instrumento europeo para SPICA.

2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Bioespectroscopía
- Espectroscopías SERS y SEIR
- Fotónica de plasmones superficiales
- Físico-química de los procesos de fotodeposición y ablación

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Espectroscopía vibracional de correlación 2D aplicada a biomoléculas.
- Estructura de componentes biológicos de alimentos derivados de pescado.
- Espectroscopía vibracional intensificada por superficies (SEVS) sobre Nanoestructuras metálicas
- Espectroscopía vibracional aplicada al estudio del Patrimonio Histórico-Artístico
- Espectroscopías SEVS aplicadas a la detección de contaminantes
- Aplicaciones biológicas del SERS: estudio de la interacción fármaco/biomolécula
- Raman de nanotubos
- Óptica de plasmones superficiales en nano-estructuras metálicas
- Propagación de plasmones superficiales de terahercios en microestructuras semiconductoras.
- Mecanismo electromagnético en espectroscopía SERS (Surface Enhanced Raman Scattering).
- Estudio de la Ablación inducida por radiación láser Infrarroja.
- Procesos fotoquímicos de deposición de fases nanométricas

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía Raman (Normal, micro-Raman, Raman mapping, Raman imaging y SERS)
- Espectroscopía IR (Normal y SEIR)
- Espectroscopía Visible-UV
- Espectroscopía de Fluorescencia
- Microscopía electrónica de transmisión y de barrido
- Técnicas analíticas y numéricas basadas en la Electrodinámica Clásica (Ecuaciones de Maxwell)

- Fluorescencia Inducida por Láser.

LABOR INVESTIGADORA

Espectroscopía vibracional de correlación 2D aplicada a biomoléculas.

Durante el año 2005 hemos aplicado la espectroscopía infrarroja de correlación bidimensional (realizada mediante intercambio isotópico H/D) y la espectroscopía Raman a la caracterización estructural de la región 5' no codificante (5'UTR) del ácido nucleico viral RNA del virus HCV y de la correspondiente proteína core en su secuencia aminoacídica 1-120. Nuestros resultados espectroscópicos son consistentes con una estructura para este ácido nucleico que presenta alrededor de 19% de bases nucleicas en uniones hélice-lazo, y aproximadamente 68% de la cadena polinucleotídica adopta estructura con la forma A de doble hélice incluyendo conformaciones nucleosídicas C(3')-endo. La espectroscopía bidimensional revela asimismo la presencia de tripletes A*A·U en la estructura terciaria del ácido nucleico y una cinética de intercambio isotópico rápida en los residuos de arginina de la proteína estudiada, lo que parece indicar una exposición de estos residuos aminoacídicos hacia el disolvente y por tanto su tendencia a interactuar con los grupos fosfato del ácido nucleico en la heteroasociación ácido nucleico-proteína conducente a la formación de la nucleocápsida viral. Estas caracterizaciones estructurales de las biomoléculas citadas aisladas se tomarán como referencia en la próxima etapa relativa al estudio estructural de los complejos virales ácido nucleico-proteína, para los que se aplicarán estas mismas técnicas espectroscópicas, dentro del marco de un proyecto subvencionado (Proyecto BQU2003-01690).

Estructura de componentes biológicos de alimentos derivados de pescado.

Uno de los objetivos de esta línea, enmarcada dentro de un proyecto financiado por la Unión Europea (Proyecto FP6-506359), es explicar las bases moleculares de las propiedades tecnológicas que confieren calidad a estos alimentos, como por ejemplo la denominada capacidad de retención de agua, que depende de la relación entre el agua libre y el agua ligada. A lo largo del año 2005 hemos puesto a punto un accesorio para realizar intercambio isotópico H/D en muestras sólidas de estos productos alimenticios a medir por espectroscopía Raman. Consiste en esencia en un tubo cilíndrico de vidrio (5 mm de diámetro y 2 cm de longitud) en cuyo interior se introduce la muestra y está provisto en sus extremos de sendas membranas de diálisis para permitir la difusión de moléculas de agua y la retención de moléculas de proteínas en el interior del tubo durante su inmersión en agua pesada. Mediante este método hemos podido determinar las cantidades relativas de agua libre y agua ligada en diferentes tipos de matrices de estos alimentos (por ejemplo, surimi y geles de surimi) con o sin fibra dietética.

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

Se ha continuado en la línea de preparación de superficies nanoestructuradas metálicas con altas prestaciones optoelectrónicas para ser aplicadas a las técnicas espectroscópicas de intensificación basadas en localización de plasmones superficiales, fundamentalmente 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. Se ha comparado la eficacia de estas nanopartículas con las obtenidas por reducción con citrato y las obtenidas por ablación obteniéndose unas mayores intensificaciones.

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 han caracterizado mediante espectroscopía IR, Raman y UV-visible. Estas películas obtenidas por inmovilización han demostrado unas buenas propiedades para ser empleadas en espectroscopía SEIR.

Se ha desarrollado también un método para inducción de nanopartículas de a.C. por irradiación láser in situ sobre interfases sólido-líquido. Este método permite el análisis in situ de moléculas y materiales diversos sin necesidad de una extracción previa de los mismos.

Una parte importante del trabajo dentro de este proyecto ha consistido en la funcionalización de las superficies metálicas obtenidas mediante autoensamblaje de moléculas orgánicas. Este método permite aumentar de manera considerable la sensibilidad y la selectividad de las nanoestructuras formadas, conduciéndonos al diseño de superficies de altas prestaciones al combinar las propiedades físicas de los sistemas metálicos obtenidos e inmovilizados con las propiedades químicas de las moléculas orgánicas autoensambladas sobre ellos. En este sentido el empleo de calixarenos con funcionalización éster ha demostrado unas propiedades interesantes a la hora de la detección por SERS y SEIR de PAHs, permitiendo un estudio selectivo de los mismos. Asimismo, el empleo de moléculas con estructura aromática y grupos amino cuaternarios, capaces de autoensamblarse sobre la superficie del metal mediante enlaces iónicos con iones cloruro, ha permitido la detección de PAHs a muy bajas concentraciones. Entre las moléculas con grupos amonio cuaternario empleadas están la lucigenina, y los pesticidas diquat y paraquat

Se han ensayado experimentos de calcinación de superficies de Ag y Au preparadas por inmovilización de nanopartículas de estos metales sobre vidrio con el fin de eliminar las impurezas orgánicas presentes en las mismas tras la obtención de las mismas. Se ha comprobado que las propiedades físico-químicas de estas nanopartículas se ven profundamente modificadas por el efecto del calor.

La caracterización de superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos ha sido posible gracias a la aplicación conjunta de las técnicas SERS y SEIR. Mientras que la primera ha sido capaz de estudiar el ligando (la molécula PAHs), la segunda permite un estudio detallado de la interacción del calixareno con el metal, así como la orientación que el receptor adopta sobre la superficie.

El estudio y caracterización de nanotubos de carbono por Raman ha merecido también una especial atención durante este año. En este sentido, hemos diseñado un mecanismo de identificación de trazas de PAHs mediante la inmovilización de nanotubos de carbono de pared simple (SWNT) sobre superficies metálicas nanoestructuradas. El sistema Ag-SWNT ha permitido la detección de pireno a concentraciones de < 1ppb.

Dentro del ámbito de la funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas, una línea novedosa comenzada este año ha sido el diseño de sistemas mixtos metal-biomolécula. En estos sistemas se combinan también las propiedades físicas de los metales con las biológicas de las biomoléculas empleadas. Por la natural tendencia de los PAHs a unirse a ADN y ácidos húmicos, se han empleado ambas biomoléculas para la detección de estos compuestos. Así, se han obtenidos resultados muy satisfactorios para el caso de detección de pireno y benzo[c]fenantreno usando ADN nativo de timo de ternera y sustancias húmicas obtenidas por ultrafiltración.

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

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, fundamentalmente los pigmentos orgánicos: alizarina, ácido carmínico y curcumina.

El pigmento alizarina se ha empleado en la caracterización de las propiedades superficiales de las nanoestructuras metálicas preparadas por diferentes métodos ya que presenta tres formas moleculares (A, B y N) cuyas proporciones relativas varían según las características del medio. Se ha llevado a cabo un exhaustivo estudio de la degradación de curcumina por efecto del pH y la irradiación, cuyas conclusiones son de gran interés para entender procesos de fotodegradación que se pueden dar en objetos artísticos.

Se han desarrollado métodos de estudio de pigmentos in situ mediante inmovilización de nanopartículas metálicas sobre superficies. Para ello se ha llevado a cabo un estudio comparativo entre nanopartículas obtenidas por reducción química y las preparadas por irradiación encontrándose las condiciones óptimas para el estudio in situ de pigmentos sobre superficies de distinta naturaleza.

Otro grupo de pigmentos que se ha comenzado a estudiar durante este año ha sido los flavonoides. Estas moléculas también han sido empleadas como pigmentos en técnicas artísticas, además de presentar unas interesantes propiedades biológicas por su acción antioxidante. A pesar de su enorme importancia son muy pocos los trabajos de caracterización de estas moléculas mediante espectroscopía vibracional. Por lo tanto, se está llevando a cabo un estudio de los modos vibracionales de un grupo seleccionado de flavonoides: cuercetina, catequina, etc.

Óptica 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 propagación y scattering de polaritones (tipo plasmón superficial) sobre superficies metálicas con defectos submicrométricos, de enorme interés en NanoÓptica. En particular, se ha profundizado en el estudio de la dependencia espectral de la reflexión, transmisión y radiación de plasmones superficiales en estructuras periódicas finitas basadas en nanod defectos metálicos: se ha analizado la influencia de las dimensiones de los nanod defectos en el balance entre los distintos canales de scattering en la región de frecuencias correspondiente al primer gap

en la relación de dispersión demostrando la importancia de la nanoescala en la optimización de eficiencias y minimización de pérdidas radiativas (crucial en el diseño de espejos eficientes de plasmones superficiales).

Propagación de plasmones superficiales de terahercios en microestructuras semiconductoras.

En particular, se ha colaborado estrechamente con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de la Universidad de Aachen (Alemania) para estudiar la propagación y transmisión de plasmones superficiales a lo largo de interfases de InSb estructuradas con líneas de agujeros rectangulares periódicamente distribuidos. En particular, se ha investigado el efecto de las variaciones térmicas, que a su vez cambian la respuesta electromagnética del medio, sobre la posición y amplitud del gap, con objeto de conseguir conmutación térmica de plasmones superficiales, logrando un magnífico acuerdo con sus resultados experimentales.

Mecanismo electromagnético 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 un substrato metálico, sobre la base de la formulación exacta del problema de scattering de ondas electromagnético conocida como formulación de las ecuaciones integrales de superficie (teorema de Green). Nuestro modelo trata de incorporar en el vector de polarización a la frecuencia Raman desplazada en una configuración tipo película molecular (Langmuir-Blodgett). 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 estudios de los procesos de ablación que tienen lugar en:

- el compuesto SiO
- el polímero PMMA dopado con yodofenoleno y yodonaftaleno

El primero de estos temas está enmarcado en el 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). Los resultados obtenidos mediante Fluorescencia Inducida por Láser (LIF) en la pluma de ablación producida mediante láseres de IR se han comparado con los obtenidos mediante la misma técnica en la pluma de ablación inducida por un láser de Nd-Yag doblado hasta 266 nm. Los resultados obtenidos fueron presentados en la 8ª Internacional Conference on Laser Ablation que tuvo lugar en Banff, Canadá.

Hemos iniciado el estudio de los mecanismos que tienen lugar en el proceso de ablación del polímero PMMA dopado con sondas fluorescentes cuando aquel se lleva a cabo mediante láseres de CO₂. El mecanismo térmico que tiene lugar en este caso, complementa y sirve de base al estudio del mecanismo fotoquímico que se espera en el

proceso de ablación inducido por láseres de femtosegundos. Mediante LIF hemos comprobado la presencia en la pluma de ablación de la sonda fenadreno (PhenH), permitiéndonos seguir la dinámica de formación de la pluma de ablación. Por otra parte hemos observado que la ablación IR produce cambios morfológicos diferentes en la superficie de PMMA's de diferentes pesos moleculares.

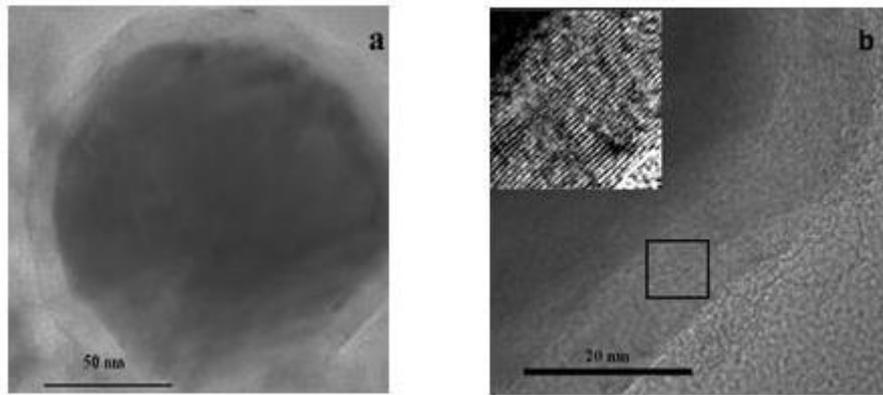
Procesos fotoquímicos de deposición de fases nanométricas.

Esta línea de investigación la llevamos a cabo en colaboración con el grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa). Durante el año 2005 hemos realizado trabajos en:

- Deposición de aglomerados metálicos de tamaño nanométrico encapsulados en estructuras poliméricas de silicio.
- Preparación de nanopartículas mixtas de Si-Se estabilizadas mediante matrices poliméricas de silicio

En el primero de los temas hemos completado el trabajo iniciado el año 2004 comprobando mediante microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) la formación a partir de pentacarbonilo de hierro ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) y de silaciclopenteno (SCP) de nanopartículas basadas en α -Fe consistentes en fases superparamagnéticas y ferromagnéticas. Estas partículas están envueltas en delgadas capas gráficas y embutidas en una matriz polimérica organosilíceica. Además, se han encontrado diferencias apreciables en las estructuras de las especies formadas cuando la correspondiente disociación es inducida por absorción resonante o por transferencia de energía intermolecular. Este trabajo ha sido publicado en la revista *Journal of Material Chemistry* 15, 4311-4317 (2005).

El segundo tema que hemos llevado a cabo es la preparación de nanopartículas mixtas de Si-Se estabilizadas por matrices poliméricas de silicio mediante la co-decomposición por láseres de CO_2 de mezclas de dimetilselenio y disilaciclobutano. Estas nanoestructuras presentan interés por sus potenciales aplicaciones en optoelectrónica y ciencia de materiales. Además, mediante LIF, hemos detectado en tiempo real la formación de la especie SiSe permitiendo así el control de su producción al variar los diferentes parámetros de la co-decomposición. Parte de estos resultados saldrán publicados en un próximo número de la Revista *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, siendo ya accesible en la Web desde el 28 de Diciembre de 2005.



Imágenes de Microscopía Electrónica de Transmisión de una partícula de α -Fe recubierta de grafito y encapsulada en fase polimérica de silicio, obtenida mediante disociación inducida con láseres IR, de una mezcla de pentacarbonilo de hierro y silaciclopentano. En b se muestra la capa de grafito y la Transformada de Fourier del área seleccionada.

2.5 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Difracción de rayos X a ángulos pequeños y ángulos grandes
- Espectroscopía de relajación dieléctrica de banda ancha
- Medidas de Micro y Ultramicrodureza
- Calorimetría Diferencial de Barrido
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua
- Reometría de Extrusión Capilar
- Análisis Dinamo-mecánico en Flexión
- Análisis Mecánico en Tracción: modulo elástico

- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización
- Cálculos mecano-cuánticos mediante Teoría de Funcionales de la Densidad
- Modelización Molecular Asistida por Ordenador. Aplicaciones a Polímeros.
- Microscopía óptica y AFM
- GPC y dispersión de luz multiángulo a alta temperatura
- Difracción de rayos X con superficies
- Microscopio de fuerzas atómicas
- Espectroscopías de absorción (XPS, Auger, UPS)

LABOR INVESTIGADORA:

Cinética de precursores de cristalización inducida mediante cizalla.

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

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

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

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

Se ha investigado la evolución de la nanoestructura en materiales compuestos de poliimida/fullereno C60 (PI/C60), sometidos a tratamiento térmico, mediante difracción de rayos X a ángulos grandes y pequeños “in situ”, utilizando la línea A2 en el sincrotrón HASYLAB/DESY de Hamburgo. El material obtenido mediante la adición del C60 a las diaminas durante el primer paso de la reacción (obtención del ácido poliámico, PAA), exhibe la aparición de un máximo en el diagrama de rayos X a ángulos bajos (SAXS). Los resultados obtenidos indican que este máximo viene fuertemente afectado por el tratamiento térmico, desapareciendo finalmente a alta temperatura. El análisis de los experimentos de difracción permite caracterizar la forma en que las nanopartículas se añaden a los otros reactivos, e influyen en las propiedades finales del material compuesto. Se ha propuesto un modelo estructural que ilustra los cambios que sufre la nanoestructura de dicho material compuesto durante el tratamiento térmico.

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

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

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

Nanoestructura y deformación mecánica de aleaciones poliméricas.

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

los procesos locales de flujo debidos a la morfología de fases separadas a escala nanométrica.

Propiedades micromecánicas de materiales nanocompuestos con nanotubos de carbono.

Los materiales poliméricos nanocompuestos con nanotubos de carbono (CNT) se están convirtiendo en sistemas estructurales importantes debido a sus buenas propiedades mecánicas y a su fácil procesabilidad. El objetivo de esta investigación, en colaboración con el Dr. G. Broza de la Universidad de Hamburg-Harburg, ha sido estudiar la influencia de la concentración de los nanotubos de carbono añadidos a los polímeros termoplásticos (polibutilen tereftalato) en las propiedades micromecánicas. Los materiales compuestos han sido preparados mediante dispersión de los nanotubos en una disolución de 1,4-butanodiol mediante la utilización de ultrasonidos. Finalmente los materiales nanocompuestos fueron sometidos a una extrusión seguida de una inyección en molde. Las muestras fueron adicionalmente caracterizadas mediante microscopía electrónica. La variación de las propiedades micromecánicas (microdureza) de los materiales nanocompuestos en función de la temperatura y del contenido de nanotubos se ha analizado a la luz de la interacción mecánica entre la matriz polimérica y los nanotubos, el grado de dispersión, la naturaleza de los nanotubos y otros parámetros estructurales.

Morfología y propiedades de materiales nanocompuestos con polímeros naturales.

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

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

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

discutido sobre la base de un modelo de entrecruzamientos moleculares recientemente desarrollado para explicar la estructura de microgrietas en polímeros amorfos.

Precusores de cristalización en polímeros naturales: almidón amorfo

Se ha investigado la evolución del almidón amorfo durante el proceso de secado mediante difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS) en tiempo real, utilizando radiación sincrotrón. Los difractogramas de este material inyectado en molde muestran la superposición de halos de difracción, indicativos de estructuras no cristalinas. La posición de los dos máximos principales de difracción se ha asociado al “scattering” de hélices de almidón sencillas desordenadas. El tercer máximo de difracción, que aparece durante el proceso de secado, se ha asociado al “scattering” que proviene de regiones desordenadas con dobles hélices. Se ha propuesto un modelo para la “superred” del almidón que presupone una componente primaria, y una componente secundaria. La componente estable que aparece primero se ha asociado a la red de entrecruzamientos existente en el estado fundido (red primaria). La segunda componente, que aparece a temperaturas más bajas (red secundaria), se puede explicar como debida a la formación de regiones de dobles hélices que densifican la red primaria. La red secundaria aumenta notablemente durante el proceso de secado. Los experimentos de WAXS realizados durante el proceso de penetración de agua, que induce una mayor movilidad molecular, revelan una estructura helicoidal con un mejor empaquetamiento, que es la precursora de la formación de dobles hélices en el estado cristalino.

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

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

Cristalización en líquidos mediante difracción de neutrones y espectroscopía dieléctrica.

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

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

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

Cristalización de polímeros controlada mediante plantillas nanoestructuradas

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

Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

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

Dinámica Molecular en sistemas amorfos

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

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

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

Modelización del proceso de copolimerización etileno-estireno mediante catálisis homogénea

Se han simulado a nivel teórico mecano-cuántico correspondiente al formalismo de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT) diversos sistemas y procesos relacionados con la copolimerización de etileno y estireno en catálisis homogénea. Cabe destacar el

trabajo realizado con la incorporación del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) en los cálculos de los perfiles energéticos de los procesos de inserción de etileno y estireno. Con la finalidad de llevar a cabo una descripción más realista del medio de reacción se ha incluido la presencia del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) en el modelo teórico y se ha evaluado la influencia de dicha especie en las barreras de inserción de etileno y estireno para el catalizador de geometría forzada, $\text{Me}_2\text{Si}(\text{C}_5\text{Me}_4)(\text{NtBu})\text{Ti}(\text{CH}_3)_2$. Dado el elevado tamaño del sistema se ha empleado para su estudio el método híbrido ONIOM (B3LYP:UFF). Los valores de energías de formación del par iónico catalizador/cocatalizador muestran que la formación del par iónico de la especie activa para la polimerización es ligeramente más favorable que la formación del par iónico de la especie durmiente. Por otro lado, los elevados valores de energías de disociación encontrados para ambos pares iónicos muestran que dicho proceso es poco probable. Por ello, para una descripción más realista del sistema catalítico se hace necesaria la inclusión del cocatalizador en el modelo teórico. Por último, se ha encontrado que, para este sistema, el efecto del MAO es el de aumentar las barreras de inserción, siendo la influencia muy similar para ambos monómeros.

Por otro lado se ha comparado el comportamiento de las especies *rac*- $\text{Et}(\text{H4Ind})_2\text{M}(\text{CH}_3)_2$ con las de su diastereoisómero *meso*- $\text{Et}(\text{H4Ind})_2\text{M}(\text{CH}_3)_2$. Se ha encontrado que la actividad para el proceso de homopolimerización de etileno en la especie *meso* es ligeramente menor que para la especie *rac*. Por otro lado, las especies *meso* podrían ser responsables de una mayor incorporación de estireno en el copolímero que las especies *rac*, ya que la inserción de 1,2 estireno en las especies *meso* lleva a especies que son capaces de continuar el proceso de copolimerización, al contrario que en el caso de las especies *rac*. Asimismo, la disminución de la actividad del catalizador al incorporar estireno sería menor para las especies *meso*.

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

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

Simulación de Propiedades de Poliolefinas

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

Síntesis de nuevas poliolefinas con arquitectura controlada

Se han obtenido diversas familias de copolímeros de etileno/estireno, mediante el uso de

distintos catalizadores de centro activo único, con objeto de establecer el efecto de la estructura de los catalizadores en los materiales poliméricos obtenidos, tanto desde el punto de vista de actividad de las reacciones de polimerización (actividad del catalizador) como desde el punto de vista estructural (pesos moleculares y polidispersidad, incorporación de comonomero y composición química de los copolímeros). En este aspecto cabe destacar la puesta a punto de una nueva técnica de caracterización estructural de poliolefinas mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización (CRYSTAF), adecuada al estudio de la composición química de los copolímeros de base olefínica, y que ha sido aplicada a los copolímeros modelo etileno/1-hexeno y etileno/estireno.

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

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

Estructura y propiedades de copolímeros modelo

En el caso de estos copolímeros de etileno/estireno, al igual que ocurría con los compuestos de etileno/1-hexeno, se ha encontrado una clara correlación entre las propiedades más básicas relacionadas con la micro y nano-estructura (temperatura de transición vítrea, grado de cristalinidad y temperatura de fusión) con el contenido en ramificaciones tipo fenilo. La combinación de las técnicas de calorimetría diferencial de barrido y espectroscopía dinamo-mecánica, ha permitido identificar claramente no solo la respuesta característica de las fases amorfa y cristalina, sino la de un tercer componente en el material, cuya respuesta parece corresponder a la de una fase desordenada aunque con un grado de rigidez semejante a la cristalina tal como

mencionábamos en la memoria del año 2004. Sin embargo la naturaleza de esta fase más rígida parece ser distinta a la que se estudió con anterioridad en los copolímeros con 1-hexeno. Esta característica deja su impronta en las propiedades macroscópicas. Así, las propiedades mecánicas como el módulo elástico varían dependiendo de la fracción presente en cada una de las fases que forman el material y de la interacción existente entre las mismas, pero también de la naturaleza del comonomero. La existencia de la fase rígida o interfacial, junto con la obtención de nuevas familias poliolefinicas mediante la introducción de un comonomero de naturaleza diferente, como es el estireno (con un anillo aromático, muy rígido, presente en la fase amorfa del material), han abierto nuevas líneas de exploración en el campo de la espectroscopía vibracional RAMAN, encaminadas a la caracterización de esta tercera fase y a la determinación de la fracción correspondiente en el material, y que se extenderán al estudio morfológico de mezclas de base etilénica.

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

Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas de poliolefinas modelo y mezclas

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

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

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

heterogéneos, de que es a través de la incorporación de ramificaciones de cadena larga la forma de modificar molecularmente las poliolefinas al objeto de eliminar las distorsiones.

Otro aspecto interesante ha sido el estudio de la dinámica molecular (huella viscoelástica) en los copolímeros de etileno/estireno obtenidos mediante distintos sistemas catalíticos. Se ha visto que los catalizadores disponibles comercialmente (catalizadores CGC) si bien dan lugar a materiales de gran homogeneidad estructural y a incorporaciones elevadas de comonomero, también permiten la incorporación de ramificaciones de cadena larga debido a reacciones secundarias a la polimerización. Si bien estas estructuras no van a afectar, en principio, a las propiedades en el sólido, si lo hacen a las propiedades viscoelásticas y al flujo. No es el caso de los materiales obtenidos mediante el nuevo catalizador, cuyas moléculas están caracterizadas por su absoluta linealidad.

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

Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados

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

Capítulo 3

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

3.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Gravedad no Perturbativa y Agujeros Negros: Simetrías, Métodos Numéricos y Analogías en Materia Condensada

Código de referencia: FIS2005-05736-C03-02

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: Guillermo A. Mena Marugán

Objetivos: Desarrollo de técnicas de cuantización no perturbativa para sistemas gravitatorios y de formalismos de horizontes en física de agujeros negros, con aplicaciones a relatividad numérica y a modelos análogos de materia condensada

Período: diciembre 2005-diciembre 2008

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

Código de referencia: FIS2004-01912

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: Guillermo A. Mena Marugán

Objetivos: Estudio de horizontes gravitatorios desde diferentes puntos de vista complementarios: teórico, numérico y mediante analogías en física de la materia condensada.

Período: mayo 2005-abril 2006

Agujeros Negros y Ondas Gravitacionales: Aspectos Cuánticos y Semiclásicos -

Código de referencia: BFM2002-04031- C02

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: Jesús Fernando Barbero González

Objetivos: El tema fundamental del proyecto es el tratamiento de la relatividad general y sus reducciones de simetría en regímenes en los que los efectos cuánticos son importantes.

Período: Octubre 2002-Septiembre 2005

Quantization of Cosmological Models and Gravitational Waves (Acción integrada HP03-140,

Código de referencia:

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: Guillermo A. Mena Marugán

Objetivos: Elaboración de formalismos cuánticos para la descripción de modelos cosmológicos y de ondas gravitatorias en relatividad general.

Período: enero 2004-diciembre 2005

Superconductividad en Nanotubos de Carbono

Código de referencia: BFM2003-05317

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: José González Carmona

Objetivos: Estudio de la competición entre la interacción de Coulomb y la interacción efectiva mediada por fonones, y del mecanismo que permite abrir transiciones superconductoras en nanotubos de carbono.

Período: Diciembre 2003-Noviembre 2005

Efectos de la Correlación Electrónica en Nanotubos de Carbono

Código de referencia: FIS2005-05478-C02-02

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador principal: José González Carmona

Objetivos: Estudio de los efectos que aparecen por interacción entre diferentes redes de átomos de carbono, y de las propiedades electrónicas de nanotubos de carbono en campos magnéticos transversos.

Período: Diciembre 2005-Noviembre 2008

Métodos de Teoría de Campos Aplicados a Materia Condensada

Código de referencia:

Entidad Financiadora: Acuerdo de cooperación CICYT-INFN

Investigador principal: José González Carmona

Objetivos: Estudio de las propiedades de renormalización de las teorías de campos efectivas para redes de carbono.

Período: Enero-Diciembre 2005

3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

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

Código de referencia: IN2P3 05-01

Entidad Financiadora: 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.

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

Código de referencia: BFM2003-05316-C02-02

Entidad Financiadora: DGI

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

Procesos Electrodébiles y Núcleos Exóticos

Código de referencia: BFM 2002-03562

Entidad Financiadora: MEC

Investigador Principal: Pedro Sarriguren

Objetivos: Desintegración beta en núcleos exóticos. Dispersión de electrones por núcleos. Núcleos con halo.

Periodo: Octubre 2002 a Octubre 2005

EURONS/ Subproyecto EXL (European Nuclear Structure III)

Código de referencia: Contract nº 506065

Entidad Financiadora: EU-VI Programa Marco, RI3

Investigador Principal: Elvira Moya

Objetivos: Determinación de secciones eficaces y excitaciones Gamow-Teller en núcleos exóticos.

Periodo: Enero 2005 a Enero 2008

European Network on Theoretical Astroparticle Physics (ENTApP-ILIAS N6)

Código de referencia: RII3-CT-2004-506222

Entidad Financiadora: EU-VI Programa Marco, RI3

Investigador Principal: Elvira Moya

Objetivos: Estudios de elementos de matriz nucleares para doble desintegración beta y materia oscura.

Periodo: Enero 2005 a Enero 2008

Optimized release from ISOL Targets (TARGISOL)

Código de referencia: HPRI - 2001 - 500063

Entidad financiadora: Unión Europea

Investigador/a Principal: Olof Tengblad

Objetivos: Optimización de las propiedades de extracción de elementos químicos en blancos radioactivos de tipo ISOL.

Periodo: Enero 2001 a Octubre 2005

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

Código de referencia: FPA2002-04181-C04-02

Entidad financiadora: CICYT

Investigador Principal: María José García Borge

Objetivos: Estudio de los núcleos con halo mediante reacciones. Presencia de polarizabilidad dipolar.

Estudios de asimetrías en la desintegración beta de los isobaros de $A=9$
Periodo: Octubre 2002 a Sept. 2005

EUROpean Nuclear Structure Integrated Infrastructure initiative (EURONS)

Código de referencia: EU Contract nº 506065

Entidad financiadora: EU-VI programa marco , RI3 (Integrated Infrastructures)

Investigador/a principal: O. Tengblad

Objetivos: Diseño de un sistema que permita la digitalización temprana de las señales de detectores de partículas cargadas obviando la electrónica intermedia evitando las limitaciones que ésta conlleva.

Periodo: Enero 2005 a Diciembre 2008

Interdisciplinary TARGISOL Winter School

Código de referencia: FPA2004-20240-E

Entidad financiadora: CICYT

Investigador/a principal: O. Tengblad

Objetivos: Cofinanciación de la segunda escuela de invierno europea TARGISOL organizada por nuestro grupo y realizada en El Escorial del 17-23 de febrero.

Periodo: Enero 2005 - Agosto 2005

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta

Código de referencia: IN2P3 05-04

Entidad financiadora: CICYT- IN2P3

Investigador/a principal: María José García Borge

Objetivos: Desarrollo de un sistema experimental para medida de partículas cargadas tras la desintegración beta, intercambio de técnicas de análisis y discusión de resultados.

Periodo: Enero 2005 a Diciembre 2005

Contribución al Experimento ISOLDE del CERN

Código de referencia: FPA2004-20178-E

Entidad financiadora: CICYT

Investigador/a principal: María José García Borge

Objetivos: Pago de la cuota a ISOLDE(CERN) y viajes para las reuniones de la colaboración de la que soy representante español.

Periodo: Septiembre 2005 a Septiembre 2006

Dinámica, estructura y modos de desintegración de núcleos exóticos ligeros. I+D para FAIR.

Código de referencia: FPA2005-02379

Entidad financiadora: CICYT

Investigador/a principal: María José García Borge

Objetivos: Caracterización de la estructura de núcleos ligeros exóticos mediante estudios de desintegración beta y reacciones a energías próximas a la barrera Coulombiana y a energías relativistas. I + D en detectores para EURONS y FAIR.

Periodo: Diciembre 2005 a Diciembre 2007

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

Código de referencia: FPA2001-2817

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: F. J. Bermejo

Objetivos: Incremento de la eficiencia de conteo en experimentos de espectroscopia neutrónica.

Periodo: 2001-2005

Finalización del espectrómetro secundario IN8C (Instituto Laue Langevin)

Código de referencia: MAT2004-20216-E

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: F. J. Bermejo

Objetivos: Incremento de la eficiencia de conteo en experimentos de espectroscopia neutrónica

Periodo: 2005-2006

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS

Código de referencia: MAT2004-21384-E

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: F. J. Bermejo

Objetivos: Desarrollo de nueva instrumentación avanzada para espectroscopia neutrónica para la ampliación de la instalación ISIS.

Periodo: 2005-2006

Estructura y dinámica microscópica de sistemas nanoestructurados

Código de referencia: MAT-2002-04540-C05-03

Entidad Financiadora: MCYT

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

Procesos de interés en la estratosfera e ionosfera terrestres. Medidas espectrométricas y ópticas en el laboratorio, y simulación teórica por métodos ab initio

Código de referencia: FIS2004-00456

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: R. Escribano

Objetivos: Estudios de fases condensadas (agua, ácido nítrico) en la alta atmósfera, y su interacción con gases traza. Estudio de procesos en plasmas fríos de especies oxigenadas y nitrogenadas presentes en la ionosfera terrestre.

Periodo: Abril 2005- Mayo 2008

Aplicaciones de plasmas fríos al desarrollo de recubrimientos y técnicas de inhibición de películas hidrogenadas para dispositivos de fusión

Código de referencia: FTN2003-08228-C03-03

Entidad Financiadora: Dirección General de Investigación, Ministerio de Ciencia y Tecnología

Investigador Principal: Isabel Tanarro

Objetivos:

1. Desarrollo y caracterización de películas de baja Z (B, Li,) mediante plasmas fríos para recubrimientos de primera pared del stellarator TJ-II del CIEMAT.
2. Estudio de NH_3 , Li y N_2 como "scavengers" en fase gas de iones y radicales y su capacidad para inhibir la formación de depósitos de carbono ricos en tritio en elementos en contacto directo con el plasma, como los divertores, en dispositivos de fusión.

Periodo: 1 Diciembre 2003- 30 Noviembre 2006

Estudio de hielos de relevancia atmosférica: hidratos de ácido nítrico constituyentes de nubes estratosféricas polares y cirros

Código de referencia: HU-2004-025

Entidad Financiadora: Dirección General de Investigación. Ministerio de Educación y Ciencia

Acción Integrada Hispano-Austriaca

Investigador Principal: Víctor J. Herrero (España) Hinrich Grothe (Austria)

Objetivos: Medidas y cálculos teóricos sobre estructura y propiedades de hidratos cristalinos de ácido nítrico.

Periodo: 1 enero 2005- 31 diciembre 2007

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

Código de referencia: FIS2004-02576

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Salvador Montero Martín

Objetivos: Estudio experimental de la producción y detección de clusters pequeños de hidrógeno, determinación de su estructura y cinética de formación.

Periodo: diciembre 2004 a diciembre 2007

Estudio experimental y teórico de colisiones moleculares de interés en astrofísica y física atmosférica

Código de referencia: HF2004-0232

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: José M. Fernández Sánchez

Objetivos:

Objetivo 1: determinación experimental y teórica de los coeficientes de transferencia para colisiones inelásticas rotacionales de los sistemas $N_2:N_2$, $N_2:He$, $H_2:H_2$, $H_2:He$ a temperaturas de $1 < T < 200$ K.

Objetivo 2: determinación experimental y teórica de los coeficientes de ensanchamiento de líneas espectrales Raman de los sistemas mencionados a temperaturas entre 150 y 300 K.

Período: enero 2005 a diciembre 2006

Producción de clusters pequeños de para-hidrógeno en criexpansión gaseosa

Código de referencia: HA2004-0080

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Salvador Montero Martín

Objetivos: Producción y detección de clusters pequeños de para-hidrógeno a muy baja temperatura, de ara a observar su predicho comportamiento superfluido .

Período: enero 2005 a diciembre 2006

Astroquímica en el laboratorio: Contribución al satélite HERSCHEL

Código de referencia: ESP2004-21060-E

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: José M. Fernández Sánchez

Objetivos: Equipar el laboratorio de Fluidodinámica Molecular para realizar medidas de alto valor en astroquímica interestelar, de cara a preparar la base científica para la explotación del satélite HERSCHEL

Período: julio 2005 a julio 2006

Red Temática QUIMILASER

Código de referencia: CTQ2004-22423-E

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: José Luis Alonso Hernández. Coordinador en IEM: José M. Fernández Sánchez.

Objetivos: Proporcionar un foro adecuado para el intercambio, discusión y divulgación de conocimiento en el campo de la "Química avanzada con láser".

Período: septiembre 2005 a septiembre 2006

Obtención de parámetros espectroscópicos de la atmósfera

Código de referencia: REN2002-01618/CLI

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Dionisio Bermejo Plaza

Objetivos:

Objetivo 1: Medida de parámetros de línea de las moléculas de C_2H_2 , C_2H_4 , CO , CO_2 , NO NH_3 a temperatura ambiente y baja temperatura.

Objetivo 2: Caracterización de estados ro-vibracionales de moléculas de interés por su participación en procesos atmosféricos:

SF_6 , CF_4 , C_3O_2 , C_2H_4 y C_2H_2

Período: Noviembre de 2002- Octubre de 2005

Control cuántico molecular: aplicaciones de interés tecnológico

Código de referencia: FIS2004-2558

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Juan Ortigoso

Objetivos: Se estudiarán aplicaciones de las técnicas de alineamiento y orientación molecular a modelos de motores moleculares, computación cuántica y destilación selectiva de isómeros.

Período: Abril 2005-Abril 2007

3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

ALMA: Preparación de la explotación científica y contribución técnica

Código de referencia: AYA 2003-02785

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: José CERNICHARO QUINTANILLA

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

Período: 2003-2006

Agreement for the development of software for the Atacama large millimetre array ALMA

Código de referencia: N.Reg. OTT: 20050573

Entidad Financiadora: ESO

Investigador Principal.: Juan Ramón PARDO CARRION/ José CERNICHARO QUITANILLA

Objetivos: Desarrollo de software para la calibración en fase y amplitud de ALMA

Período: 2005-2008

Molecular Universe

Código de referencia: MRTN-CT-2004-512302

Entidad Financiadora: Comunidad Europea

Investigador Principal: José CERNICHARO QUINTANILLA

Objetivos: Preparación de la explotación científica de Herschel. Colaboración a escala europea en la obtención de datos moleculares básicos con los laboratorios de química-física.

Período: 2005-2008

Diseño y estudio de viabilidad de la contribución española (en especie) a la construcción del “Atacama Millimeter Array” (ALMA)

Código de referencia: AYA2002-10113

Entidad Financiadora: MCyT

Investigador Principal: Jesús MARTÍN-PINTADO MARTÍN

Objetivos: Desarrollo tecnológico y científico en Radioastronomía

Período: 2003 prorrogado

Herschel: Contribución al centro de control del instrumento HIFI y al programa científico

Código de referencia: ESP2002-01627

Entidad Financiadora: MCyT

Investigador Principal: Jesús MARTÍN-PINTADO MARTÍN

Objetivos: Desarrollo tecnológico y científico en proyectos espaciales

Período: 2002-2004

Herschel: Contribución al Centro de Control del Instrumento HIFI. Desarrollo herramientas datos de cartografías espectrales

Código de referencia: ESP2002-12407-E

Entidad Financiadora: MCyT

Investigador Principal: Jesús MARTÍN-PINTADO MARTÍN

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

Período: 2004-2005

Herschel: Contribución al centro de control del instrumento HIFI y al programa científico

Código de referencia: ESP2004-00665

Entidad Financiadora: MCyT

Investigador Principal: Jesús MARTÍN-PINTADO MARTÍN

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

Período: 2005-2007

Estudio ab initio espectroscópico de especies moleculares de interés astrofísico

Código de referencia: AYA2002-02117

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: M. Luisa SENENT DIEZ

Objetivos: Estudio ab initio espectroscópico de especies no-rígidas, radicales hidrocarbonados y policiclos aromáticos de interés astrofísico

Período: 2002-2005

Estudio teórico de especies moleculares de interés astrofísico detectables con los nuevos instrumentos Herschel y ALMA

Código de referencia: 2004C10001

Entidad Financiadora: CSIC-Universidad de Chile

Investigador Principal: M. Luisa SENENT DIEZ (ESPAÑA), J.R. LETELIER (CHILE).

Objetivos: Caracterización de especies moleculares de interés para Herschel y ALMA.

Período: 2004-2005

Desarrollo de infraestructura Gris para la implementación de una organización virtual de Química Computacional

Código de referencia: PBI-05-009

Entidad Financiadora: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha dentro del plan regional de Investigación Científica, Desarrollo Tecnológico e Innovación de Castilla-La Mancha

Investigadora Principal: Camelia MUÑOZ CARO

Objetivos: Desarrollo de la infraestructura Gris necesaria para soportar una organización virtual de Química Computacional. El Sistema permitirá la exploración masiva de hipersuperficies de energía potencial molecular en moléculas de interés astrofísico.

Período: 2005-2007

Estudio ab initio espectroscópico de especies moleculares de interés astrofísico. Preparación científica de Herschel y ALMA”

Código de referencia: AYA2005-00702

Entidad Financiadora: MEC plan Nacional I+D+I

Investigador Principal: M. Luisa SENENT DIEZ

Objetivos: Desarrollo de la infraestructura Gris necesaria para soportar una organización virtual de Química Computacional. El Sistema permitirá la exploración masiva de hipersuperficies de energía potencial molecular en moléculas de interés astrofísico.

Período: 2005-2008

Espectroscopia de moléculas no-rígidas

Código de referencia: Proy. 37075-E

Entidad Financiadora: coNaCYT de México

Investigador Principal: María VILLA VILLA

Objetivos: Estudio ab initio espectroscópico de especies no-rígidas

Período: 2002-2005

Cálculos mecano-cuánticos de moléculas de interés astrofísico: Preparación Científica de Herschel y ALMA

Código de referencia: HF 2003-0293

Entidad Financiadora: Acción integrada España/Francia

Investigador Principal: José CERNICHARO QUINTANILLA (ESPAÑA), Nicole FEAUTRIER (FRANCIA)

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

Período: 2004-2005

Participación Española en MIRI para el JAMES WEBB SPACE TELESCOPE: Fase B

Código de referencia: ESP2002-11060-E

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: Luis COLINA ROBLEDO

Objetivos: Desarrollo de la participación española en el JWST

Período: 2003-2005

Estudio multifrecuencia del KPC central de galaxias activas

Código de referencia: AYA2002-01055

Entidad Financiadora: MCyT

Investigador Principal: Luis COLINA ROBLEDO

Objetivos: Investigación básica en Astrofísica Extragaláctica

Período: 2003-2005

Fase B del instrumento de infrarrojo medio del JWST. Participación IEM/CSIC

Código de referencia: 2002-11060

Entidad Financiadora: MCYT, ESP

Investigador Principal: Luis COLINA ROBLEDO

Objetivos: desarrollo de la fase B del simulador criogénico del telescopio

JWST 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

Participación en el instrumento MIRI del JWST y proyecto científico asociado

Código de referencia: ESP2005-01480

Entidad Financiadora: MEC

Investigador Principal: Luis COLINA ROBLEDO

Objetivos: desarrollo de la fase B del simulador criogénico del telescopio JWST.

Participación en la realización de las pruebas funcionales y de calibración del instrumento MIRI.

Participación en el equipo científico europeo de MIRI.

Estrellas Masivas en el infrarrojo y radio: Modelos y observaciones

Código de referencia: AYA2004-08271-C02-02

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: Francisco NAJARRO DE LA PARRA

Objetivos: Estudio de estrellas masivas en el infrarrojo y radio

Período: 2004-2007

Data análisis of IR emisión from active galactic nuclei

Código de referencia: NNG04GC83G

Entidad Financiadora: NASA ADP

Investigador Principal: M. ELITZUR

Objetivos: Interpretación de observaciones de AGNs

Período: 2004-2007

Star formation in luminous infrared galaxies: Giant HII regions and super star clusters

Código de referencia: HST-GO-10169

Entidad Financiadora: NASA

Investigador Principal: Almudena ALONSO HERRERO

Objetivos: Interpretación de observaciones de ULIRGs

Período: 2004-2006

In depth study of the antennae with nicmos and ACS

Código de referencia: HST-GO-10188

Entidad Financiadora: NASA

Investigador Principal: B. WHITMORE

Objetivos: Observaciones de la galaxia ANTENNAE con el HST

Período: 2004-2005

The most massive Stars

Código de referencia: LTSA04-0000-0008

Entidad Financiadora: NASA

Investigador Principal: D. Figer

Objetivos: Estudio de estrellas masivas con datos de satélites y telescopios espaciales de la NASA.

Período: 2004-2007

3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

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

Código de referencia: Proyecto BQU2003-01690

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: P. Carmona.
Objetivos: mecanismo de ensamblaje de la nucleocápsida del virus HCV.
Período: Noviembre 2003-Noviembre 2006.

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

Código de referencia: Proyecto FP6-506359
Entidad financiadora: Unión Europea (VI Programa Marco)
Coordinador: Torger Borrensen. Danish Institute for Fisheries Research (DIFRES) (Dinamarca).
Objetivos: mejora de la calidad de alimentos de pescado para el consumidor.
Período: 2004-2008.

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

Código de referencia: FIS2004-00108
Entidad financiadora: Dirección General de Investigación, Ministerio de Educación y Ciencia
Investigador Principal: José Vicente García Ramos.
Objetivos: Estudio de procesos de intensificación electromagnética sobre nanopartículas metálicas y aplicación a detección de contaminantes.
Período: Diciembre 2004 - Diciembre 2007

Estudio científico de vidrieras históricas: procesos de degradación, materiales y técnicas para su restauración y conservación

Código de referencia: GV05/134
Entidad financiadora: Generalitat Valenciana.
Investigador Principal: Sonia Murcia Mascarós.
Objetivos: Estudio espectroscópico de los efectos de la restauración de vidrieras.
Período: Enero 2005 - Diciembre 2006

Detección de moléculas aisladas sobre superficies metálicas nanoestructuradas mediante espectroscopías vibracionales y electrónicas intensificadas por superficie.

Código de referencia: GR/MAT/0439/2004
Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid
Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.
Objetivos: Aplicación de técnicas espectroscópicas de superficie al estudio de sistemas moleculares altamente dispersos.
Período: Enero 2005 - Diciembre 2005

Detection of Trace Quantities of Molecules by Chemical Sensors Based on Metallic Nano-Particle Surfaces.

Código de referencia: CBP.EAP.CLG 981232
Entidad financiadora: OTAN
Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.
Objetivos: Empleo de DNA como receptor en la funcionalización de nanopartículas metálicas para la detección de contaminantes.
Período: Enero 2005 - Diciembre 2006

Cultural Heritage

Código de referencia: FP6-513915
Entidad financiadora: Marie Curie Fellowships for Early Stage Training Human Resources and Mobility activities.
Coordinador: C. Sáiz. Investigador Principal del Módulo de Física: J.V. García Ramos.
Objetivos: Aplicación de técnicas espectroscópicas vibracionales y electrónicas al estudio de la conservación del Patrimonio Histórico-Artístico.
Período: Mayo 2005-Mayo 2008

Métodos Analíticos para Documentación Integral del Arte Rupestre Prehistórico.

Código de referencia:
(MADIARP). Proyecto Intramural de Frontera del CSIC
Coordinador: Juan Manuel Vicent. IP del subproyecto 2: J.V. García Ramos.
Objetivos: Aplicación de técnicas espectroscópicas vibracionales y electrónicas al estudio de la conservación del Patrimonio Histórico-Artístico referente al Arte Rupestre.

Período: Noviembre 2005 – Octubre 2007

Flavonoids as Antioxidants: Interactions with Free Radicals and Metal Ions.

Código de referencia: 2004IT0023

Entidad financiadora: Acuerdo CSIC-CNR

Investigador Principal: J.V. Garcia Ramos y A. Torreggiani (U. Bologna)

Objetivos: Estudio espectroscópico de flavonoides

Período: Enero 2005- Diciembre 2007

Aplicaciones de la espectroscopía SERS (Surface Enhanced Raman Scattering) a la determinación de residuos tóxicos en alimentos.

Código de referencia: HI2004-0373

Entidad financiadora: Acción Integrada España-Italia.

Investigador Principal: J.V. Garcia Ramos y G. Smulevich (U. Firenze).

Objetivos: Análisis de antibióticos en alimentos mediante espectroscopía SERS.

Período: Enero 2005- Diciembre 2006

Fotónica de plasmones superficiales en metales nanoestructurados: Dispositivos para Nano-Óptica

Código de referencia: GR/MAT/0425/2004

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid

Investigador Principal: J. A. Sánchez Gil.

Objetivos: Estudio teórico de la propagación y dispersión de plasmones superficiales sobre superficies metálicas estructuradas con redes de defectos nanométricos acanalados, explorando su fenomenología asociada para aplicaciones en Nano-Óptica.

Período: Enero 2005-Diciembre 2005

Dinámica no lineal en sistemas ópticos disipativos

Código de referencia: BFM2003-0427

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: J. M. Soto Crespo

Objetivos: Estudio de la formación de pulsos localizados de luz y de la propagación de modos guiados en sistemas disipativos no lineales y/o desordenados

Período: Enero 2004-Diciembre 2006

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

Código de referencia: 2004MX0025

Entidad financiadora: Acuerdo CSIC-CONACYT, ESPAÑA-MÉJICO

Investigador Principal: J. A. Sánchez Gil.

Objetivos: Estudio de la dispersión de luz por interfases con rugosidad a escala nanométrica en dos configuraciones de interés para explorar la intensificación del campo EM local en el caso de interfases metálicas (y su impacto en la detección SERS de moléculas aisladas) y la localización en el caso de guías de onda (y su aplicación como láser aleatorio).

Período: Enero 2004-Diciembre 2005

Ablación y Disociación con Láseres: estudios fundamentales para aplicaciones tecnológicas

Código o Referencia: BQU2003-08531-C02-02

Entidad Financiadora: Dirección General de Investigación (MCyT)

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: 15-11-2003 a 14-11-2006

Reacciones inducidas con láseres de IR para la deposición de calcogenuros nanoestructurados.

Código o Referencia: 2004CZ0011

Entidad Financiadora: CSIC- Subdirección General de Relaciones Internacionales

Investigador Principal: L. Díaz y J. Pola

Objetivos: Obtención de depósitos nanoestructurados

Periodo: 1-1-2003 a 31-12-2004

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

Código de referencia: FPA2001-2139

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: Diciembre 2001-Diciembre 2005

Nuevas Poliolefinas basadas en copolímeros de etileno

Código de referencia: MAT2002-01242

Entidad Financiadora: MCYT

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana

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

Período: Marzo 2003-October 2006

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

Código de referencia: FIS2004-01331

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja

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

Período: Diciembre 2004- Diciembre 2007

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

Código de referencia: MAT2004-05865

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: M^a José Capitán Aranda

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

Período: Diciembre 2004-Diciembre 2007

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

Código de referencia: MAT2005-01768

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2008

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

Entidad Financiadora: Fundación Alexander von Humboldt Stiftung

Investigador español: Francisco J. Baltá Calleja

Investigador alemán: G. H. Michler

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

Período: 2001-2005

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

Código de referencia: G5RT-CT-2001-05026

Entidad Financiadora: CE

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: 2002–2006

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

Entidad Financiadora: COLCIENCIAS

Investigador Principal: Fernando Echeverri

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

Período: Abril 2003-Marzo 2005

Structuring Polymers COST-P12

Entidad Financiadora: EC

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro y M. Gómez

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

Período: 2003-2007

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

Código de referencia: II-03-073 EC

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: 1 Enero 2004-31 Diciembre 2006

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

Código de referencia: ME-964

Entidad Financiadora: European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja

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

Período: 2004-2005

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

Código de referencia: MERG-CT-2004-505674

Entidad Financiadora: CE

IP: Aurora Nogales

IR: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: Enero 2004-Abril 2005

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

Código de referencia: SC-1571

Entidad Financiadora: CE; European Synchrotron Radiation Facility

Investigador Principal: M^a Cruz García Gutiérrez

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

Período: Octubre 2004-Marzo 2005

Nanostructure Development in Polymer Systems: Influence of External Constraints

Código de referencia: II-04-029 EC

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja

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

Período: 2004-2006

Study of self-organized systems on surface

Código de referencia: II-03-071 EC

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY)

Enero 2004-Diciembre 2006

Investigador Principal: M^a José Capitán Aranda

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

Período: Enero 2004-Diciembre 2006

Multifunctional Polymeric Materials through Nanostructuring

Código de referencia: MERG-CT-2004-511908

Entidad Financiadora: CE

IP: M^a Cruz García Gutiérrez

IR: Tiberio A. Ezquerro

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

Período: Enero 2005-Enero 2006

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

Código de referencia: ME-1024

Entidad Financiadora: CE European Synchrotron Radiation Facility

Investigador Principal: M^a Cruz García Gutiérrez

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

Período: Marzo 2005-Septiembre 2005

Puntos cuánticos magnéticos autoorganizados

Código de referencia: CM-GR/MAT/0435/2004

Investigador Principal: J.M. Gallego

Investigador Participante: M.J. Capitán

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

Período: 1 Enero 2005-31 Diciembre 2005

Sistemas modelo biomiméticos de procesos en superficies

Código de referencia: NAN2004-08881-C02-01

Entidad Financiadora: ME y C

Investigador Principal: R. Miranda

Investigador Participante: M.J. Capitán

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

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2008

Nanoestructuras magnéticas: Fabricación, propiedades y Aplicaciones Biomédicas y Tecnológicas

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid -2005

Investigador Principal: R. Miranda

Investigador Participante: M.J. Capitán

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

Período: Diciembre 2005-Diciembre 2009

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

Código de referencia: I-05-009 EC

Entidad Financiadora: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY), Alemania

Investigador Principal: E. Melo

Investigador Participante: M.J. Capitán

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

Período: Enero 2005-Enero 2006

Capítulo 4 COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES

4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

XXX Reunión Bienal de la R.S.E.F., Orense, 12-16 de Septiembre.

Transiciones de Fermi y mezcla de isospín en un modelo de campo medio autoconsistente
(Comunicación oral)

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

XXX Reunión Bienal de la R.S.E.F., Orense, 12-16 de Septiembre.

Efecto de la deformación nuclear en la desintegración beta de isótopos de plomo pobres en neutrones
(Comunicación oral)

O. Moreno, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra

XXX Reunión Bienal de la R.S.E.F., Orense, 12-16 de Septiembre.

Experimentos de dispersión de electrones en ELISE@FAIR (Comunicación oral)

J.M. Udías, C. Fernández-Ramírez, R. Álvarez-Rodríguez, J.L. Herraiz, O. Moreno, E. Moya de Guerra, J.R. Vignote

XXX Reunión Bienal de Física, Orense (España), 12-16 septiembre.

CALIFA, un Calorímetro Gamma de Absorción Total para R3B (Comunicación oral)

Héctor Álvarez, M.José García Borge, Dolores Cortina, Ignacio Durán, Olof Tengblad y Manuela Turrión.

Reunión de Grupo Especializado de Física Nuclear de la Real Academia Española de Física, Ávila (España), 24-25 noviembre.

Manuela Turrión (Asistencia)

4.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

I Congreso de la Federación Española de Sociedades de Nutrición, Alimentación y Dietética (FESNAD)

Lugar y fecha: Madrid. Marzo 2005.

Título de la participación: Estudio de la adición de fibra dietética de trigo en las propiedades reológicas y estructurales de geles de surimi.

Tipo de participación: Poster

Participantes: I. Sánchez-González, P. Carmona y M. Careche

2nd Nanospain Workshop. Año: 2005. Mes: Marzo. Localidad: Barcelona.

Improving the selectivity and sensitivity of molecular sensors based on nanoparticle enhanced (vibrational) spectroscopies (NES): Raman-SERS and infrared-SEIRA. J.V. García-Ramos, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, M.V. Cañamares, J.A. Sánchez-Gil, P. Leyton and M. Campos-Vallette.

(Panel)

2nd NANOSPAIN Workshop, Barcelona, 14 de Marzo-17 de Marzo
Surface plasmon photonics on nanostructured metal surfaces (póster)
J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, E. R. Méndez y A. A. Maradudin

2nd Nanospain Workshop, Barcelona (España), 14 – 17 de Marzo de 2005.
Ir Laser Induced Gas-Phase Deposition Of Iron Nanoparticles Embedded In A Polymeric Matrix. L. Díaz,
M. Santos, C. Ballesteros, J. Pola.

VII Congreso de Fotoquímica (Reunión Bienal del Grupo de Fotoquímica de la RSEQ), Logroño (España), 21-24 de Junio de 2005.
Mecanismos de Ablación Láser del SiO desde el Infrarrojo al Ultravioleta. L. Díaz, M. Santos, J.A Torresano, M. Castillejo, M. Jadraque, M. Martín, M. Oujda, E. Rebollar

4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

VI Congreso Nacional de Materiales Compuestos, Valencia, 27-29 Junio.
Determinación del estado de orientación en compuestos de PE con fibras de celulosa mediante medidas de microdureza (Comunicación oral)
C. Fonseca, A. Ochoa, M.F. Mina, C. González, P. Cardin, F. Ania

IX Reunión del Grupo Especializado de Polímeros: “Nuevas Fronteras en Polímeros, Jaca (Huesca), 11-15 Septiembre
Propiedades mecánicas de copolímeros de etileno/1-hexeno y etileno/estireno obtenidos mediante catalizadores de centro activo único (Comunicación oral)
M^a Teresa Expósito Espinosa, S. Martín, A. Flores, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar

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

II Reunión de la Asociación Española de Usuarios de Radiación Sincrotrón – AUSE, San Lorenzo de El Escorial (Madrid). 28-30 Septiembre
La difracción de superficies con rayos-X: hitos y tendencias (Conferencia)
M.J. Capitán

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

Resolving kinetics of early structure formation during shear-induced crystallization of polypropylene (Póster)
A. Flores, L. Fernández Ballester, D.W. Thurman, F. Ania, F.J. Baltá Calleja, J.A. Kornfield.

Structural changes during cold drawing of nanocomposites based on single wall carbon nanotubes and poly(ether ester) (Póster)
J.J. Hernández Rueda, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, A. Sanz, I. Sics, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra

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

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

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

4.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Encuentros Relativistas Españoles, Oviedo (España), 6 de Septiembre-10 de Septiembre
Exact Quantization of Einstein-Rosen Waves Coupled to Massless Scalar Matter (Comunicación)
J. Fernando Barbero G., [Iñaki Garay](#) y Eduardo J. S. Villaseñor

XIII Encuentro de Otoño de Geometría y Física, Bilbao (España), 14 de Septiembre-16 de Septiembre
Einstein-Rosen Waves Couple to Massless Scalar Matter (Comunicación)
J. Fernando Barbero G., [Iñaki Garay](#) y [Eduardo J. S. Villaseñor](#)

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de Septiembre-1 de Octubre
Exact Quantization of Einstein-Rosen Waves Couple to Massless Scalar Matter (Comunicación)
J. Fernando Barbero G., [Iñaki Garay](#) y Eduardo J. S. Villaseñor

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de septiembre-30 de septiembre.
Real (imperfect) clocks and the Zeno effect (Comunicación Oral).
[Luis J. Garay](#).

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de septiembre-30 de septiembre.
Unitary evolution in Gowdy T3 cosmologies (Comunicación Oral).
Jerónimo A. Cortez y [Guillermo A. Mena Marugán](#).

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de septiembre-30 de septiembre.
Second-order perturbations of spherical spacetimes (Comunicación Oral).
[David Brizuela](#), [José. M. Martín-García](#) y [Guillermo A. Mena Marugán](#).

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de septiembre-30 de septiembre.
On the Schrodinger representation for a scalar field on curved spacetimes (Comunicación Oral).
[Jerónimo A. Cortez](#).

II Workshop on Aspects of Quantum Gravity, Covilha (Portugal), 28 de septiembre-30 de septiembre.
Stability of acoustic black holes in Bose-Einstein condensates (Comunicación Oral).
Luis J. Garay y [Gil Jannes](#).

4th Meeting on Constrained Dynamics and Quantum Gravity, Cala Gonone (Italia), 11 de septiembre-16 de septiembre.
Unitary time evolution in the Gowdy T3 model (Comunicación Oral).
Jerónimo A. Cortez y [Guillermo A. Mena Marugán](#).

Singularity Formation for Nonlinear Evolution Equations, Viena (Austria) , 16-22 de mayo
Hyperbolicity of second order in space systems of evolution equations (Comunicación)
J. M. Martín García

New directions in Numerical Relativity, Southampton (Reino Unido), 18-19 de agosto
Asistencia sin comunicación.
J. M. Martín García

Perspectives of Hight End Computing, Munich (Alemania), 7 de diciembre
Asistencia sin comunicación.
J. M. Martín García

Nanoscience and Nanotechnology, Frascati (Italia), 14 de Noviembre-16 de Noviembre
Electronic instabilities of small-diameter carbon nanotubes (Comunicación Oral)
[E. Perfetto](#) y J. González

6th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Goteborg (Suecia), 26 de Junio-1 de Julio
Current instability and diamagnetism in small-diameter carbon nanotubes (Poster)
J. González

6th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Goteborg (Suecia), 26 de

Junio-1 de Julio
Low-energy instabilities of small-radius zig-zag nanotubes (Poster)
E. Perfetto y J. González

4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

2nd Interdisciplinary TARGISOL Winter School, El Escorial, Madrid, 17-23 Febrero
Coating metals prepared by electroplating (Comunicacion oral)

M. Alcorta

Production at ISOLDE of Li isotopes close to the neutron drip-line (Comunicacion oral)

M. Madurga

International Workshop on Neutron Brillouin Scattering, Perugia (Italia), 12-14 Junio
Density Dependence of the Collective Excitations in Liquid para-Hydrogen: Some predictions from Path
Integral Centroid Molecular Dynamics (Conferencia invitada)

F. J. Bermejo

Int. Conf. on Finite Fermionic Systems, Nilsson Model 50 years, Lund (Suecia), 14 -18 de Junio
Low lying resonance states in the ${}^9\text{Be}$ continuum (Comunicación Oral)

M.J.G. Borge et al.

Working group and collaboration meeting R3B de FAIR, Valencia (España), 16-17 junio
Contribución del IEM al diseño del calorímetro (Comunicación oral)

Manuela Turrión

Int. Workshop on Physics with low energy beams at SPIRAL 2, Caen (Francia), 4-5 de Julio
Beta-delayed particle studies at SPIRAL 2 (Conferencia invitada)

M.J.G. Borge

12th Euroschool on Exotic Beams, Mainz (Alemania), 25 de Agosto – 2 de Septiembre

- Nuclear shape dependence of Gamow-Teller distributions in neutron deficient lead isotopes (Poster)
P. Sarriguren, O. Moreno, R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra
- Half-lives of rp-process waiting point nuclei (Poster)
R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra
- Multiple particle emission in the ${}^{11}\text{Li}$ beta-decay
M. Madurga, M.J.G. Borge, H.O.U. Fynbo, H. Jeppesen, K. Riisager and O. Tengblad

International School of Nuclear Physics 27th Course Neutrinos in Cosmology, in Astro, Particle and Nuclear Physics, Erice, Sicilia (Italia), 16-24 de Septiembre

- Effect of deformation on two-neutrino double beta decay matrix elements (Comunicación oral)
R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, L. Pacearescu, A. Faessler, F. Simkovic.
- Signatures of nuclear deformation in beta decay patterns (Comunicación oral)
O. Moreno, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra.

SCINT2005-International Conference on Inorganic Scintillators and their Industrial Applications,
Crimea, (Ucrania), 17-24 de Septiembre

R&D towards a total absorption gamma spectrometer for the R^3B experiments at FAIR
(Comunicación oral)
Olof Tengblad

XVI International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Nuclear Energy,
Varna (Bulgaria), 19-26 de Septiembre

- Gamow-Teller strength and Nuclear Deformation (Conferencia Invitada)
P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno, E. Moya de Guerra
- Spectral functions, momentum distributions and relativistic nuclear models. (Conferencia Invitada)
E. Moya de Guerra
- Three-body systems, bound states and resonances (Conferencia invitada)
E. Garrido

XII Nuclear Physics Workshop Marie and Pierre Curie, Polonia, 21-25 de Septiembre.
The Exactly Solvable Richardson Model in the BCS-BEC Crossover (Conferencia invitada)
Jorge Dukelsky.

International Workshop on Correlations in quantum systems: quantum dots, quantum gases and nuclei, Palma de Mallorca, (España), 26-30 Septiembre.
Integral Models in the BCS-BEC crossover (Conferencia invitada)
Jorge Dukelsky

International Workshop on Correlations in Quantum Systems: Quantum Dots, Quantum Gases, and Nuclei, Palma de Mallorca (España), 26-30 de Septiembre.
Espectral functions momentum distributions and superscaling with relativistic nuclear models (Conferencia invitada)
Elvira Moya de Guerra

Working group and collaboration meeting R3B de FAIR, Santiago de Compostela (España), 28-30 de Septiembre.
Manuela Turrión (Asistencia)

VI Latin American Symposium on Nuclear Physics and Applications, Iguazú (Argentina), 3-7 de Octubre.
On line Release Simulator of Radioactive Beams produced by ISOL (Comunicación oral)
Manuela Turrión, Olof Tengblad, Luis M. Fraile, M. José García Borge, Eva Reillo, Edward Morrissey

NUPAC, Presentacion ante el Directorado del CERN de las líneas presentes y futuras de este campo en ISOLDE, CERN(Suiza), 10-12 Octubre.
Decay studies (Conferencia invitada)
M.J.G. Borge

Collaboration Meeting on Scaling in Nuclei, Quark-Gluon Plasma, and Effective Field Theory, Trento (Italia), 7-13 de Noviembre.
Scaling function within the Coherent Density Fluctuation Model (Conferencia invitada)
Elvira Moya de Guerra

The 3rd International Workshop on the Dynamics of Complex Systems, Sendai (Japón), 16-19 Noviembre.
Glassy dynamics as studied by Muon spin Rotation and Muon Spin Relaxation, (Conferencia invitada)
F. J. Bermejo

NNR05 Workshop: Neutrino Nuclear Responses, Spring-8/Osaka (Japón), 30 Noviembre-8 Diciembre.
Double beta decay matrix elements and nuclear shapes (Conferencia invitada)
Elvira Moya de Guerra

13th International Conference: Recent progress in Many-Body Theories, Buenos Aires (Argentina), 5-9 de Diciembre.
Exact BCS solution in the BCS-BEC crossover (Conferencia invitada)
Jorge Dukelsky

2nd Argonne/MSU/JINA/INT RIA Workshop, Michigan (USA), 9-12 Marzo.
Is the optical model valid for the scattering of exotic nuclei?(Comunicación oral)

Joaquín Gómez-Camacho, M.J.G. Borge

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca (Spain), 11-16 Septiembre
“Theoretical study of ternary systems of atmospheric relevance: water, nitric acid and hydrogen chloride”
(poster), P. C. Gómez, R. Escribano y B. Martín

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca (Spain), 11-16 Septiembre
“Rotational relaxation at low temperature in free jets CO/Ne, and CO/He studied with Resonance-Enhanced
Multiphoton Ionization (REMPI) Spectroscopy” (póster).

G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Torres, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, I. Tanarro, B. Martínez-Haya

European Geosciences Union General Assembly (EGU 05), Viena (Austria), 24-29 Abril
The HCl/H₂O solid system: infrared spectra of HCl tri- and hexahydrate (poster), Herrero, V.J.,
Escribano, R.; Fernández-Torre, D.; Maté, B.; Moreno, M.A.; Ortega, I.K.

European Geosciences Union General Assembly (EGU 05), Viena (Austria), 24-29 Abril
Exposure of NAT crystals to HCl: a spectroscopic study (c. oral), Escribano, R.; Fernández-Torre, D.;
Herrero, V.J.; Maté, B.; Ortega, I.K.

60th International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (EEUU), 20-24 Junio
“NAT crystals exposed to HCl: a systematic RAIR investigation” (c. oral), R. Escribano, V.J. Herrero, B.
Maté, M.A. Moreno e I.K. Ortega.

60th International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (EEUU), 20-24 Junio
Presidencia de la sesión “Jet and beam”, Victor J. Herrero
“The HCl/H₂O solid system: infrared spectra of HCl tri- and hexahydrate” (c. oral), V.J. Herrero, R.
Escribano, D. Fernández-Torre, B. Maté, M.A. Moreno e I.K. Ortega

60th International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (EEUU), 20-24 Junio
NATO- ARW: Remote Sensing of the Atmosphere for Environmental Security, Rabat, (Marruecos) 16-20
Noviembre 2005
"RAIR Spectra of Stratospherical Relevant Ices" I. K. Ortega, D. Fernández-Torre, R. Escribano,
V.J.Herrero, B. Maté, M.A. Moreno. (Póster)

XXVIIth International Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG) Eindhoven, Holanda, 18-22 Julio, 2005

“Kinetics and diagnostics of DC and modulated cold plasmas of air. Investigation of Neutral and Ion
Chemistry”

I.Méndez, M. Castillo, V. J. Herrero, I. Tanarro (Póster)

VIIIth Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS)

California, USA, 15-19 Julio 2005

“Influence of rotation and isotope effect on the dynamics of the N(²D)+H₂ reactive system”

F. J. Aoiz, L. Bañares, T. González-Lezana, V. J. Herrero, I. Tanarro (póster)

NATO- ARW: Remote Sensing of the Atmosphere for Environmental Security, Rabat, (Marruecos) 16-20 Noviembre 2005

"RAIR Spectra of Stratospherical Relevant Ices" I. K. Ortega, D. Fernández-Torre, R. Escribano,
V.J.Herrero, B. Maté, M.A. Moreno. (Póster)

7th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics, Lisboa (Portugal), marzo

Watching the birth of a hydrogen droplet (Conferencia Plenaria)

S. Montero

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11 al 16 de septiembre

Translation-rotation state-to-state rate coefficients for para-hydrogen collisions with helium (Póster)
B. Maté, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero, and F. Thibault

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11 al 16 de septiembre
Raman spectra and polarizability surface of H₂O, D₂O, and HDO (Póster)
G. Avila, J. M. Fernández, G. Tejeda, and S. Montero

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11-16 Septiembre.
Stimulated Raman: a powerful tool for high resolution spectroscopy (Conferencia Invitada)
D. Bermejo

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11-16 Septiembre
High Resolution Raman Spectroscopy and analysis of the ν_2 and $2\nu_6$ bands of ³⁴SF₆ (Póster) V.
Boudon, J.L. Doménech, A. Ramos, D. Bermejo and H. Willner

European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy, Oxford (Reino Unido), 10-12 Abril
Theoretical and experimental analysis of N₂-H₂ stimulated Raman spectra. (Póster)
L. Gómez, D. Bermejo, P. Joubert and J. Bonamy

NATO Advanced Research Workshop “Remote Sensing of the Atmosphere for Environmental Security”
Rabat, Marruecos, 17-19 Noviembre 2005
High-resolution Raman spectroscopy of the ν_2 and ν_5 bands of ³⁴SF₆
Ramos, J. L. Doménech, D. Bermejo, V. Boudon.

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11-16 septiembre.
Nearly perfect orientation for molecules with a small dipole moment (Poster)
Juan Ortigoso y Julio Santos

4.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

IAU Symposium 231 “Astrochemistry Throughout the Universe: Recent Successes and Current Challenges” Asilomar (California), EE.UU 28 Agosto-2 Septiembre
Alcohol chemistry in the Galactic Center. Hot core chemistry without hot cores. Poster. M. A. Requena Torres, J. Martín-Pintado, Martín, A. Rodríguez Franco, S. Martín y N. J. Rodríguez Fernández.
Oxygen Chemistry in the Circumstellar Envelope of the carbon-rich star IRC+10216. (poster), M. Agúndez y J. Cernicharo.
Grain processing along the evolution of shocks in L1448-mm/IRS3. (póster). I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, S. Martín & J. M. Winters.
Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216. (charla). J. P. Fonfría Expósito, J. Cernicharo, M. J. Richter, and J. Lacy.
Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216. (poster). J. P. Fonfría Expósito, J. Cernicharo, M. J. Richter, and J. Lacy.

Kick off meeting of the phase a for ESI (SPICA), Garchin (Alemania), Varias reuniones en 2005.
Participación del DAMIR a través de F. Najarro y J. Cernicharo

Matrix (2005), Coimbra (Portugal), 24-29 de julio
Molecular Spectroscopy in Gas and Ices in Space. Invited talk

Protostars and Planets V, Kona, Hawaii, 22-30 de octubre
Participación en la conferencia (J. Cernicharo)

Optimising Tools for Science with HIFI, Leiden (Holanda), 5.8 Diciembre 2005,
OTF map processing, Conferencia Jesus Martin-Pintado

Optimising Tools for Science with HIFI, Leiden (Holanda), 5.8 Diciembre 2005,
Status and next steps of ICC additional projects: OTF map processing. Conferencia, Javier Corrales

IAU Symposium 227. Massive Star Birth: A Crossroads of Astrophysics, Acireale (Italia), 15-20 de mayo.

A new intermediate mass protostar in the Cepheus A HW2 region. Conferencia . J. Martín-Pintado.

Extragalactic and Galactic ISM modelling in ALMA Perspective, Gotemburgo (Suecia), 12-15 de septiembre)

The Galactic Center. Conferencia. J. Martín-Pintado

ALMA amplitude calibration review, Grenoble, 25 de Agosto 2005,

Semitransparent vane calibration. Conferencia Jesús Martín-Pintado

Molecular Spectroscopy Conference, Ohio, EE.UU, 20-25 de junio

Vibrational spectra of non-rigid molecule: ethane. (poster). M. Villa, R. Hidalgo, M.L. Senent

The Hunt for Molecules. Paris Sep 2006.

The interpretation of Water Vapor Observations. Invited talk (J. Cernicharo)

Congreso de Espectroscopia Molecular, Salamanca, España, 11-16 septiembre

Vibrational spectra of a non rigid molecule: ethane. (poster), M. Villa, R. Hidalgo y M.L. Senent

Ab initio study of the rotacional-torsional spectrum of methyl format. (poster). R. Domínguez-Gómez,

M.L. Senent, M. Villa y F.J. Meléndez

Interstellar C4: ab initio theoretical study. (poster). H. Masso, M.L. Senent, J.R. Goicoechea, J. Cernicharo y M. Hochlaf

Molecular Line Survey and Spectroscopic Model of a C-rich Protoplanetary Nebula (póster) Juan R. Pardo, J. Cernicharo

Cuarta Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica, Chihuahua, México, 21-26 de Noviembre

Espectro rotovibracional del etano. (poster). R. Hidalgo, M. Villa y M.L. Senent

XVI Spanish-Italian Congreso on the Thermodynamics of Metal Complexes, Udine, Italia, 13-18 de junio

Experimental and theoretical study of the salicylhydroxamic-acid Deprotonation Processs. (poster). B.

García, M.L. Senent, S. Ibeas, J.M. Leal, M. Venturini and F. Seco

Science perspectives for 3D Spectroscopy. Munich (Alemania), 10-14 de noviembre

3D Spectroscopy of Luminous Infrared Galaxies, L. Colina

Integral Field Spectroscopy of the interacting galaxy Arp299 (IC694+NGC3690), M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero, E. Mediavilla

Simulations of high-z starburst galaxies for the JWST-MIRI integral field unit, M. García-Marín,

N.P. Florente, A. Glasse, L. Colina, G. Wright

European Geosciences Union – General Assembly 2005, Viena, Austria, 24-29 de abril

Measured telluric continuum-like opacity beyond 1 THz, J.R. Pardo, E. Seraby, M.C. Wiedner

KITP Conference: The Paradoxes of Massive Black Holes: A Case Study in the Milky Way, Santa Bárbara, USA, 2005

Massive Stars and metalicity at the galactic Center. (Conferencia invitada), F. Najarro

XVII Canary Islands Winter School of Astrophysics: 3D Spectroscopy. Tenerife (España),

21 Noviembre-2 Diciembre.

Integral Field Spectroscopy of the interacting galaxy Arp299 (IC694+NGC3690), M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero, E. Mediavilla

Simulations of high-z starburst galaxies for the JWST-MIRI integral field unit, M. García-Marín, A.

Lorente, A. Glasse, L. Colina, G. Wright.

CanariCam Science Team Meeting, Madrid – España, 19-21 Diciembre de 2005

TReCS preliminary results of NGC 7130. (Conferencia). T. Díaz-Santos

4.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTONICOS

11th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules

Lugar y fecha: Aschaffenburg (Frankfurt), Alemania. Septiembre 2005.

Título de la participación: Infrared Investigation of HCV Core Protein Structure by Principal Component Analysis and 2D Correlation Spectroscopy.

Tipo de participación: conferencia invitada.

Participantes: P. Carmona, A. Rodríguez-Casado, M. Molina.

11th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules

Lugar y fecha: Aschaffenburg (Frankfurt), Alemania. Septiembre 2005.

Título de la participación: Study of protein and water structure in Allaska Pollack surimi gels in the presence of wheat dietary fibre

Tipo de participación: poster.

Participantes: I. Sánchez-González, P. Carmona, M. Careche.

11th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules

Lugar y fecha: Aschaffenburg (Frankfurt), Alemania. Septiembre 2005.

Título de la participación: Conformational features of truncated HCV core protein in virus-like particles.

Tipo de participación: poster.

Participantes: A. Rodríguez-Casado, M. Molina, P. Carmona.

IntradFood 2005 Conference.

Lugar y fecha: Valencia, España. Octubre 2005.

Título de la participación: Influence of grape dietary fibre on the rheological, colorimetric and structural properties of minced horse mackerel.

Tipo de participación: Poster

Participantes: I. Sánchez-González, P. Carmona, M. Careche.

11th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules.

Aschaffenburg (Alemania). 3-8 Septiembre.

Interaction of Alizarin with Ovalbumin Studied by Surface-enhanced Raman Spectroscopy

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

11th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules.

Aschaffenburg (Alemania). 3-8 Septiembre.

Characterization by Different Spectroscopy Techniques of the Complex Formed by the Antitumoral Drug Emodin with Bovine Serum Albumin

P. Sevilla, J. M. Rivas, F. G. Blanco, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés

Workshop: “Idrolizzati Proteici: Metodi di Analisi e Attività Biostimulante”.

Arzignano (Italia), 25 Noviembre.

Spectroscopy on Nanostructured Metal Surfaces: Application to the Study of Peptidic Molecules and Humic Substances of Soils

S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos.

COST Action G7:Real time optical Equipment for Environmental aspects and the Response of Artwork

Año: 2005. Mes: Mayo. Localidad: Tulcea (Rumanía)

Application of SERS spectroscopy to organic pigments related to Cultural Heritage. J.V. García-Ramos (Comunicación Oral)

Surface Plasmon Photonics 2, Graz (Austria), 22 a 26 de Mayo

Surface plasmon polaritons on surfaces with sub-wavelength structures: from nano-Optics on metals to THz waves on semiconductors (póster)

J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini y A. A. Maradudin.

Surface Plasmon Photonics 2, Graz (Austria), 22 a 26 de Mayo

Surface plasmon polaritons on surfaces with sub-wavelength structures: from nano-Optics on metals to THz waves on semiconductors (póster)

J. A. Sánchez-Gil, V. Giannini y A. A. Maradudin.

Surface Plasmon Photonics 2, Graz (Austria), 22 a 26 de Mayo

Electromagnetic model for the Raman-shifted radiation from a Langmuir-Blodgett film on a rough metal surface (póster) V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. Méndez.

Progress In Electromagnetic Research Symposium (PIERS 2005), Hangzhou (China), 22 a 26 de Agosto.

Light Propagation through Randomly Spaced Partial Reflectors in a Single Mode Optical Fiber (comunicación oral)

H. Pérez, N. Lizárraga, E. I. Chaikina, E. R. Méndez y J. A. Sánchez-Gil.

Progress In Electromagnetic Research Symposium (PIERS 2005), Hangzhou (China), 22 a 26 de Agosto.

Scattering of Surface Plasmon Polaritons by Surface Structures (comunicación oral)

T. A. Leskova, A. A. Maradudin y J. A. Sánchez-Gil.

8th Conference on Laser Ablation,

Banff (Canada), 11 -16 de Septiembre de 2005

Mechanisms of SinOm cluster formation and fragmentation in the laser ablation of SiO targets at 266 nm.

M. Jadrake, M. Martín, M. Santos, L. Díaz, M. Sawczak, A. Cenian and G. Sliwinski

4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

F.J. Baltá Calleja

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

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

T.A. Ezquerra

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

M.J. Capitán

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

Restricted Dynamics in semicrystalline aromatic polyesters (Conferencia invitada)

T.A. Ezquerra

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

Participación en el Comité Científico Evaluador

T.A. Ezquerra

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

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

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

Research Project Review Panels (PRP) HASYLAB-DESY, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 2 Mayo
Asistencia a la Comisión de Evaluación:
F.J. Baltá Calleja

Symposium on the Scientific Potential of a Short Pulse Option at PETRA III, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 2 Mayo
Asistencia:
F.J. Baltá Calleja

PSC (Photon Science Committee) Meeting: “Symposium on the Scientific Potential of a Short Pulse Option at PETRA III”, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania). 2 Mayo .
Asistencia como Vocal del Comité Científico:
F.J. Baltá Calleja

GISAXS-Workshop, HASYLAB, Hamburgo (Alemania). 10-12 Mayo
Asistencia:
F. Ania
M.C. García Gutiérrez
D.R. Rueda

10. Symposium: Deformation Mechanisms in Micro- and Nanostructured Polymers, Halle (Alemania), 18-22 Mayo
Advances in microdeformation mechanisms in semicrystalline polymers studied by indentation methods (Conferencia invitada)
F.J. Baltá Calleja

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

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

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

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

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

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

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

M.C. García Gutiérrez

Carbon Nanotube (CNT)-Polymer Composites International Conference, Hamburgo (Alemania), 4-7 Septiembre

Low Percolation Threshold in Nanocomposites Based On Oxidized Single Wall Carbon Nanotubes and Poly(butylene terephthalate) (Conferencia invitada)

A. Nogales, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, A. Sanz, M.C. García-Gutiérrez, D.R. Rueda, C. Domingo, T. A. Ezquerra

Shear-induced self-assembly of single-wall carbon nanotubes in a polymer-nanocomposite: Templating of crystallization (Conferencia invitada)

M.C. García Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, C. Domingo, J.V. García-Ramos, T.A. Ezquerra

Asistencia:

T.A. Ezquerra, J. Hernández

Modeling Interactions in Biomolecules II, Praga (Chequia), 4-8 Septiembre

Conceptual DFT descriptors to model organometallic reactivity (Conferencia)

V.L. Cruz, J. Ramos, S. Martinez and J. Martinez-Salazar

Second Workshop of Young European Scientists, YES2005, Jagiellonian University, Cracovia (Polonia) 13-18 Septiembre

Entanglement network and molecular dynamics in single-site catalysed polyolefins (Comunicación oral)

J.F. Vega

XIV Encuentro Anual de la Asociación Alexander von Humboldt de España, Sevilla, 15-18

Septiembre

Asistencia:

F.J. Baltá Calleja

European Discussion Meeting on Polymer Physics “Polymer Crystallization”, Waldau (Alemania),

5-8 Octubre

Order and segmental mobility in semicrystalline polymers (Conferencia invitada):

T.A. Ezquerra

Management Committee Meeting COST Physics, Action P12

Waldau (Alemania), 5-8 Octubre 2005

Asistencia:

T.A. Ezquerra

Reunión del Comité de Selección de Científico de Línea en el Sincrotrón francés SOLEIL

Grenoble (Francia), 4 y 5 Diciembre 2005.

Asistencia como miembro del Comité de Selección:

T.A. Ezquerra

4.3 ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

4.3.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Sergio Dain (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut, Golm, Alemania), 13 de junio a 21 de junio

4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Henrik Bak Jeppesen, (Universidad de Aarhus, Dinamarca), 1 Febrero a 28 Abril
A. Kievsky, (Universidad de Pisa, Italia), 14 al 18 de Marzo
A.A. Antonov, (Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria), 10 al 27 de Abril
S. Dimitrova, (Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria), 10 al 17 de Abril
T.W. Donnelly, (Massachusetts Institute of Technology, USA) 21 al 28 de Junio

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Dr. H. Grothe, (Technische Universität, Wien), 7 de Octubre a 17 de Octubre

4.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

François Lique, (Observatorio de Meudon, Paris, Francia), 10 de enero a 6 de febrero y 2-16 de Mayo
Dr. Bertrand Le Floch (LOAG, CNRS, Grenoble, Francia) 4-15 de abril y 13-23 de Noviembre
Dra. Ana Monrreal Ibero (AIP, Alemania) 6-12 de Marzo y 21-27 de junio
Dr. Donald Figer (Instituto Científico del Telescopio Espacial, Baltimore, USA), 21-23 de marzo
Dr. Artemio Herrero Davó (IAC-Univ. La Laguna) , 6-10 de junio y 19-22 de septiembre
Dr. Achim Puls (Univ. De Munich, Alemania), 19-22 de septiembre
Dr. Santiago Arribas Mocoroa (Instituto Científico del Telescopio Espacial, Baltimore, USA), del 4-15 de julio
Dra. Maria Villa Villa (Universidad Autónoma Metropolitana de Mejico, Mejico D.F.), del 1-15 de septiembre
Dr. Jorge Ricardo Letelier (Univ. Santiago de Chile, Chile), 18-30 de septiembre.
Dra. Annie Spifieldel (Observatorio de Meudon, Paris, Francia), Octubre
Dra. Nicole Feautrier (Observatorio de Meudon, Paris, Francia), Octubre

4.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Patricio Leyton Bongiorno

- **Universidad de Chile, Santiago de Chile, 13 Abril al 15 Mayo.**

Josef Pola

- Academia de Ciencias de la República Checa. Instituto de Procesos Químicos Fundamentales. Republica Checa, del 2 de Abril al 8 de Abril de 2005.

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

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

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

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

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

4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

4.4.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Aleksandar Mikovic (Universidade Lusofona, Lisboa, Portugal):
Spin foam models of quantum gravity, 24 de febrero.

Sergio Dain (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut, Golm, Alemania):
On the existence of initial data containing black holes, 16 de junio.

Sascha Husa (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut, Golm, Alemania):
Light and shadow in Numerical Relativity, 22 de junio.

Olivier Sarbach (Theoretical Astrophysics and Relativity Group, California Institute of Technology, Estados Unidos):
The initial-boundary value problem in General Relativity and numerical applications, 26 de julio.

Jesús Salas (Grupo de modelización, simulación y matemática industrial, Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III, Madrid, España):
¿Qué podemos aprender del límite $q \rightarrow 0$ del modelo de Potts? , 15 de noviembre.

4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Antonio García-García (Universidad de Princeton, USA):**La Transición Anderson en Caos Cuántico y Cromodinámica.**

Jorge Hirsch (Universidad Nacional Autónoma de México):**Fluctuaciones y caos en las masas nucleares.**

Stefan Rombouts (Universidad de Gante, Bélgica): **The Monte Carlo method**

A.A. Antonov (Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria): **Superscaling and nuclear momentum distributions in nuclei.**

T.W. Donnelly (Center for Theoretical Physics, M.I.T., EEUU): **Parity-violating electron scattering from nucleons and nuclei.**

Roman Wolski (Flerov Laboratory Nuclear Reactions JINR, Dubna, Rusia): **Physics with Radioactive Beams at Dubna.**

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Franck Thibault (Université de Rennes, Francia):
Collisional Lineshapes and Rate Constants

Robert Grisenti (Institut für Kernphysik, J. W. Goethe Universität, Frankfurt a. M., Alemania):
Cryogenic Rayleigh droplet beams and their potential as novel tool for probing superfluidity in quantum

fluids

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

4.5 VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES

4.5.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Luis J. Garay

-Max Planck Institut für Quantenoptik, Garching, Alemania. 1 febrero a 15 de febrero

José María Martín García

-Universidad de Southampton, Reino Unido, 27 de marzo a 13 de abril.

-Erwin-Schrödinger-Institut, Austria, 7 a 22 de mayo

-Universidad de Jena, Alemania, 27 de noviembre a 10 de diciembre

4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Manuela Turrión Nieves

- ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza, 15 de enero al 7 de febrero, 4 de marzo al 12 de abril, 19 al 29 de mayo, 28 de junio al 18 de julio, 14 de octubre al 20 de noviembre, 26 de noviembre al 18 de diciembre.
- GANIL, Caen, Francia, 18 de julio al 22 de julio.

Eduardo Garrido Bellido

- Instituto Nacional de Física Nuclear, Pisa, Italia, del 15 al 22 de Enero.
- Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, Dinamarca, del 24 de Abril al 1 de Mayo, y del 4 al 10 de Septiembre de 2005.

M^a José García Borge

- Centre d'Études De Physique Nucleaire de Bordeaux-Gradignan, Université de Bordeaux I(Francia), del 20 de Noviembre al 20 de Diciembre.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano, Víctor J. Herrero

Universidad Politécnica de Viena, Austria, 23 a 29 de Abril

Ismael Kenneth Ortega

Universidad Politécnica de Viena, Austria, 11 a 18 de Diciembre

Dionisio Bermejo Plaza

Clarendon Laboratory, Universidad de Oxford, Reino Unido, 3-9 julio

Dionisio Bermejo Plaza

Université du Franche Comté, Besançon, Francia, 23-29 Octubre

Dionisio Bermejo Plaza

Université de Rennes I, Francia, 20-26 noviembre

Isabel Méndez

Instituto de Metodología Inorgánica y de Plasmas (CNR) Bari (Italia) 4 de octubre a 7 de diciembre

Beatriz Martín Llorente

Department of Earth Sciences, University of Cambridge. Cambridge (Reino Unido) 2 de octubre a 1 de diciembre.

Laura Gómez Martín

Laboratoire de Physique Moléculaire, Université du Franche-Comté, Besançon (Francia) 20 Septiembre a 20 Diciembre.

4.5.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla

- Univ. Leiden, Leiden, Holanda, 17-27 de abril
- Univ. Leiden, Leiden, Holanda, 7-14 de julio
- San Francisco-Asilomar (California), 25 agosto-3 septiembre
- Paris, Francia, 18-26 de septiembre
- Kona, Hawai, 22-30 de octubre

Jesús Martín Pintado

- El Escorial, Madrid, España, 7-13 de mayo
- Asilomar, (California), 28 Agosto – 3 septiembre

María Luisa Senent Díez

- Centro de Cálculo Interuniversitario Italia CINECA, Bologna, Italia, 4-22 de abril
- Paris, Francia, 16-22 de mayo
- Paris, Francia, 27 junio-7 julio
- Universidad Autonoma Metropolitana de México, Mexico, 1-21 de Noviembre

Luis Colina Robledo

- Space Telescope Science Institute, Baltimore, USA, 29 junio – 20 julio
- Astronomy Department, Univ. Florida, Gainesville, 21 – 30 julio

Francisco Najarro de la Parra

- Universidad de Munich, Alemania, 15-22 de octubre

Juan Ramón Pardo Carrión

- IRAM, Granada, España, 14-22 de marzo
- Congreso EGU, Viena, Austria, 23-30 de abril
- Asilomar (California), NASA-GISS, New York, EE.UU., 25 agosto-11 septiembre
- Observatorio CSO, Hilo, Hawaii, 28 noviembre-12 diciembre

Almudena Alonso Herero

- University of Oxford, U.K. 1-7 de febrero

Miguel Angel Requena Torres

- Caltech, Asilomar, (California), 27 Agosto – 5 septiembre
- Universidad de California, Los angeles. Los Angeles, EE.UU., 29 de Julio-25 de Octubre, Estancia breve, beca FPI

Izaskun Jiménez Serra

- 231 IAU Symposium, Asilomar, (California), 28 agosto-5 septiembre
- Osservatorio Astrofissico di Arcetri, Florencia, Italia, 2 mayo-3 julio
- University College London, Londres, U.K., 22 septiembre- 21 diciembre
- Telescopio IRAM PdBI, Grenoble, Francia, 17-24 julio
- JCMT, Mauna Kea, Hawai, 5-14 septiembre
- Telescopio IRAM 30m, Granada, España, 14-22 noviembre

Javier Corrales García

- Groningen, Holanda , del 8 de febrero-4 de marzo, 11-29 de junio, 12-30 de septiembre, 28 Noviembre – 16 diciembre

Arturo Rodríguez Franco

- Asilomar, New York ,(California)., 25 agosto- 4 septiembre

Pablo Fonfría Exposito

- Asilomar, (California), EE.UU, (Caltech) ., 28 agosto-3 septiembre
- Observatorio de Paris , Les Houches, Francia, 25 septiembre – 1 octubre

Belén Tercero Martínez

- Telescopio IRAM, 30 m, Granada, España, 7-15 de abril
- Asilomar, New York , (California) 28 agosto-5 septiembre

Marcelino Agúndez Chico

- Escuela de verano: “mm Observing Techniques and Applications”, IRAM, Granada, España, 30 Septiembre – 7 Octubre.
- School of Physics and Astronomy, University of Manchester, Manchester, Reino Unido, 4 Julio – 25 Septiembre. Estancia breve, beca FPU
- Telescopio CSO, Mauna Kea, Hawaii, EE.UU., 1 – 11 Diciembre.
- Les Houches, Francia, 25 septiembre – 1 octubre
- IRAM, Granada, España, 1-7 de octubre

David Teyssier

- Telescopio IRAM 30m, Granada, España, 9-15 de febrero
- SRON, Groningen, Holanda, 28 febrero – 13 abril

Fabien Daniel

- Asilomar, New York ,(California), 28 agosto-5 septiembre

Helena Massó González

- Theoretical Chemistry, Chemical Center, Lund University, Lund, Suecia. 4 abril – 3 junio

Arancha Amo Baladron

- Asistencia a la Summer School de IRAM, Granada. Del 30 de octubre Al 7 de Septiembre de 2005.

Macarena Garcia Marin

United Kingdom Astronomy Technology Centre Edimburgo, Escocia, 31 Agosto-1 Noviembre

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

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

Tiberio A. Ezquerro

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

Daniel R. Rueda

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

M^a Esperanza Cagiao

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

Fernando Ania

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

M^a José Capitán

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

Araceli Flores

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

M^a Cruz García Gutiérrez

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

Aurora Nogales

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

Juan Francisco Vega

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

Jaime J. Hernández Rueda

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

Sonia Martínez Hedo

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

Inés Puente Orench

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

Alejandro Sanz Parras

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

Capítulo 5

ACTIVIDAD DOCENTE Y OTRAS

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.1.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Físicas.

Relatividad General Avanzada y Agujeros Negros (4.5 créditos), Luis J. Garay y F. J. Chinae

5.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Físicas

Física Nuclear y Fusión (3 créditos), Mención de calidad. M^a José García Borge

Curso interuniversitario de Física Nuclear. Impartido en el IEM

Física Nuclear Experimental (4 créditos), Mención de calidad. M^a José García Borge

5.1.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Universidad Autónoma de Madrid.

Astrofísica Molecular (3 créditos), José Cernicharo Quintanilla

Universidad Autónoma de Madrid

Atmósferas Estelares. (4 créditos, 40 horas) Mención de calidad. Profs: A. Herrero y F. Najarro;

5.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

J.V. García Ramos

- Espectroscopía Raman: Nuevas tendencias y aplicaciones. Facultad y universidad: Facultad de Ciencias. UNED. Madrid. Enero-Septiembre 2005. N^o de créditos: 6

5.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Jesús Fernando Barbero González

-Cylindrical Quantum Gravity. Spinoza Institute for Theoretical Physics-Universidad de Utrecht, (Holanda) 14 de junio.

Luis J. Garay

-Condensados de Bose-Einstein diluidos: el peso del sonido. Universidad Complutense de Madrid (España). 11 de mayo.

-Principios de Relatividad y Leyes de la Física. Instituto de Enseñanza Secundaria – San Fernando de

- Henares (España). 14 de marzo.
- Principios de Relatividad y Leyes de la Física. V Semana de la Ciencia. Ayuntamiento de El Escorial (España). 12 de noviembre.
 - Principios de Relatividad y Leyes de la Física. Jornadas « Einstein : Cien años de relatividad ». Tomelloso (España). 15 de noviembre.
 - Principios de Relatividad y Leyes de la Física. Colegio Mayor Cisneros de La Universidad Complutense de Madrid (España). 24 de noviembre.

José María Martín García

- Hyperbolicity of second order systems with constraints. Universidad de Jena (Alemania). 28 de noviembre
- Tensor computational algebra. Universidad de Jena (Alemania). 30 de noviembre.

5.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

César Fernández-Ramírez

- Resonancias nucleónicas: Estudio de sus propiedades mediante fotoproducción de pión,. IEM, CSIC, 19 de Octubre.

Elvira Moya de Guerra

- Maratón Homenaje a Einstein: Ponga a Einstein en su vida, Museo Nacional de Ciencia y Tecnología, Madrid, 17 de Marzo.

M^a José G^a Borge

“ Beta decay at the drip line” 11 octubre, CERN (Ginebra, Suiza)

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Isabel Tanarro

“Diagnostics and kinetic modelling of plasmas of air and nitrogen oxides generated in hollow cathode discharges”

Institut für Niedertemperatur-Plasmaphysik, Greifswald (Alemania) 20 de Octubre de 2005

Isabel Tanarro

“Plasmas: El cuarto estado natural de la materia” Semana de la Ciencia. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC Madrid (España) 15 de Octubre de 2005

Dionisio Bermejo Plaza,

“Stimulated Raman: a tool for high resolution spectroscopy” Université du Franche Comté, Besançon, Francia, 26 octubre.

Dionisio Bermejo Plaza,

“Stimulated Raman: a tool for high resolution spectroscopy” Université de Rennes I, Francia , 23 noviembre.

5.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Jose Cernicharo Quintanilla

- The Hunt for Molecules. Paris Sep 2006.
The interpretation of Water Vapor Observations. Invited talk (J. Cernicharo) (60 aniversario P. Encrenaz)
- Título, ESTELAR: De las estrellas a nuestro mundo. Los beneficios directos de la Astronomía en la Sociedad, Semana de la Ciencias 2005, Malaga, España, 11-12 de Noviembre

Maria Luisa Senent Díez

- Curso de iniciación a la química Computacional, Departamento de Química, Facultad de Ciencias de la Universidad de Burgos, Burgos, España, abril
- Cadenas carbonadas de interés astrofísico: el C4, Universidad de Cuernavaca, Cuernavaca, Mexico, Noviembre
- Cadenas carbonadas de interés astrofísico: el C4, Universidad Autónoma Metropolitana de México, Mexico, Noviembre

Luis Colina Robledo

- Extragalactic Studies and future IFS science, Escuela Internacional de invierno “3D Spectroscopy”, Tenerife 27 de noviembre- 2 de diciembre

Miguel Angel Requena Torres

- Alcohol Chemistry in the Center of our Galaxy, UCLA Division of Astronomy and Astrophysics, Los Angeles, EE.UU. 11 de Octubre.

Marcelino Agúndez Chico

- “Oxygen Chemistry in the Circumstellar Envelope of the carbon-rich star IRC+10216”, Escuela de verano “Molecular Astrophysics”, Les Houches, Francia, 25-30 Septiembre.

José Pablo Fonfría Expósito

- Physical and Chemical Conditions in the Dust Formation Zone of IRC+10216, Molecular Astrophysics Summerschool, Les Houches, Francia, 29 de Septiembre.
- Astrofísica Molecular: Del experimento del laboratorio a la observación del Universo. Ciclo de conferencias de becarios predoctorales del Instituto de la Estructura de la Materia. Madrid, España, 18 de Abril.

Francisco Najarro

- “Massive Stars in the Galactic Center” Ámsterdam, 7 marzo 2005

Macarena García Marín

- Integral Field Spectroscopy of (U)LIRGs at low and high redshift, Edimburgo, UKATC, 31 Octubre 2005

5.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**José Vicente García Ramos**

---*Espectroscopía Raman sobre Nanoestructuras Metálicas: Nuevos Sustratos SERS y algunas Aplicaciones.* Instituto de Física Aplicada. CSIC. Madrid. 13 de mayo.

---*Espectroscopía Raman sobre Nanoestructuras Metálicas: Nuevos Sustratos SERS y algunas Aplicaciones.* Departamento de Física. Universidad Pública de Navarra. Pamplona. 30 de mayo

---COST Action G7: Real time optical Equipment for Environmental aspects and the Response of Artwork Mayo 2005. Tulcea (Rumanía)

---Application of SERS spectroscopy to organic pigment related to Cultural Heritage.
(Comunicación oral)

Santiago Sánchez Cortés

---*Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas.*
Curso de Iniciación a la investigación en Estructura de la Materia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid. 1 de Abril.

---*Surface-enhanced Vibrational Spectroscopies: New Developments and Applications.* Instituto para la síntesis orgánica e fotoquímica (ISOF, CNR). Bolonia (Italia). 24 Noviembre

José A. Sánchez Gil

---Surface plasmon photonics on surfaces with sub-wavelength structures: from nano-Optics on metals to THz waves on semiconductors. Donostia International Physics Center, San Sebastián, 26 de enero.

---Óptica de plasmones superficiales: Nanoestructuras metálicas (visible) y Microestructuras semiconductoras (THz), Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria, Santander, 28 de abril.

---Fotónica: desde la Macroestructura a la Nanoestructura, Curso de verano de la Universidad de Cantabria, Castro-Urdiales, 4 a 6 de julio.
Surface Plasmon Optics on Nanostructured Metals (visible) & Microstructured Semiconductors (THz), Departamento de Óptica, División de Física Aplicada, CICESE, Ensenada, Méjico, 11 de noviembre.

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

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

Javier Martínez de Salazar

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

Tiberio A. Ezquerro

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

M^a José Capitán Aranda

- Synchrotron light as a powerful tool for materials analysis. XII International Summer School. Organizado por el Instituto Nicolás Cabrera-UAM. Responsable: L. Soriano E.G. Michel. Participación en el Comité Científico Organizador. Septiembre 2005.

- Principios y aplicaciones de la difracción de rayos X en superficies. Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC, 28 Octubre.
- Técnicas de caracterización mediante radiación sincrotrón. Curso de post-grado y especialización. Organizado por el Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC. Responsable: A. Caballero y A. Muñoz Paez. Octubre 2005.

Mari Cruz García Gutiérrez

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

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

5.3.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Pablo Galán

Incertidumbre mínima y escalas invariantes en gravedad cuántica.
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC (Madrid). 22 de septiembre.

Luis J. Garay

Condensados de Bose-Einstein diluidos: el peso del sonido.
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC (Madrid). 6 de abril.

Guillermo A. Mena Marugán

II Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia.
- Secretario y organizador del curso.
- Charla: Física de Agujeros Negros.
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC (Madrid). 16 a 18 de marzo.

5.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Antonio García-García

- La Transición Anderson en Caos Cuántico y Cromodinámica. Universidad de Princeton,(USA), 15 de junio.

Jorge Hirsch

- Fluctuaciones y caos en las masas nucleares. Universidad Nacional Autónoma de Mejioco (Méjico DF), 21 de junio.

Stefan Rombouts

- The Monte Carlo method. Universidad de Gante (Bélgica), 24 de noviembre.

Manuela Turrión Nieves, Olof Tengblad y M^a José G^a Borge

2nd International Interdisciplinary

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano, Chairman

19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, Salamanca, 11-16 septiembre,

Victor J. Herrero

“Física Molecular de Atmósferas y Plasmas” II curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Madrid (España) Marzo 2005

J.M. Fernández

"Espectroscopía Raman en chorros supersónicos". II Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, Madrid (España) Marzo 2005

5.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

L. Colina, A. Alonso-Herrero

First CanariCam Science Meeting

19-20 de diciembre, IEM Madrid

F. Najarro

Conferencia “Estrellas Masivas” en el “2º Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia” (Curso de Postgrado-CSIC, mar 05).

5.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Pedro Carmona

Aplicaciones Biológicas de la Espectroscopía Vibracional. Institución y lugar: Instituto de Estructura de la Materia (CSIC).Madrid. 30 Enero.

5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Mari Cruz García Gutiérrez

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

Juan Francisco Vega

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

Victor Cruz.

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

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

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



Conferencias:

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

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

Aurora Nogales

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

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

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

Asistencia:

Jaime Hernández Rueda

Inés Puente Orench

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

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

5.4.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

Miembros del Comité Académico de la **36ª Olimpiada Internacional de Física**, en Salamanca, 3 a 12 de julio de 2005:

- J. Fernando Barbero: presentación del primero de cuatro problemas de la Olimpiada
- Luis J. Garay: presentación del tercero de cuatro problemas de la Olimpiada, y corrector
- José M. Martín: responsable informático, y corrector
- David Brizuela: corrector
- Iñaki Garay: corrector

5.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Elvira Moya de Guerra

- Miembro del "Board of Directors del ECT* (European Center for Theoretical Studies in Nuclear Physics and Related Areas), 2002 a la actualidad.
- Miembro del Comité Científico Asesor del CSIC, desde 2004.

Mª José García Borge

- Miembro del Comité de la Colaboración ISOLDE (CERN), desde enero de 2003.
- Jefe del Dpto de Física Nuclear y Física Estadística, desde el 12 de febrero de 2003.
- Miembro del "Body of associates of ECT*" desde 2004 al 2007.
- Colaborador científico de la "Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva" (ANEP) desde que se creó en 1990. Miembro del Tribunal de Selección para Ramon y Cajal en 2005.
- Organizadora de 2 Conferencias:
 - o Conferencia "Int. Workshop on Physics with low energy beams at SPIRAL 2", Caen (Francia), 4-5 Julio 2005.
 - o *"2ND INTERDISCIPLINARY TARGISOL WINTER SCHOOL" EL ESCORIAL, MADRID 17-23 FEBRERO 2005.*

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano

Miembro del Comité Científico de los siguientes Congresos internacionales:

- Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy (Europa)
- International Symposium on Molecular Spectroscopy, Columbus (EEUU)

Salvador Montero Martín

- Miembro del Comité Editorial del Journal of Raman Spectroscopy, Wiley (Reino Unido)

5.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

J. Cernicharo

- Miembro del panel "Astrofísica y Astropartículas" de ESFRI (UE).
- Mission Scientist de Herschel
- Miembro del Comité Científico del plan Nacional Francés "Physico-Chimie du Milieu Interstellaire" (2005-2009)
- Miembro del Board del FP6 "The Molecular Universe" (2005-2008)
- Chairman del SOC de la Conferencia pan-ALMA que se celebrará en Madrid en 2006.

Luis Colina Robledo

Miembro del Comité Científico del European Virtual Observatory, European Southern Observatory, Alemania (2005-2008)

5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja

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

Javier Martínez de Salazar

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

Tiberio A. Ezquerro

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

M^a José Capitán Aranda

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

Victor Cruz

- Coordinador para el CSIC en el "Nanotechnology Consortium"

Juan Francisco Vega

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

M^a Cruz García Gutiérrez

- Miembro del Tribunal para juzgar la siguiente tesis doctoral:"Interacción entre nanoestructura y dinámica en materia condensada blanda: Polímeros frente a compuestos de bajo peso molecular" de

D Alejandro Sanz Parras. Departamento de Química Física, Universidad de Alcalá, Diciembre 2005.

Jaime J. Hernández Rueda

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

Alejandro Sanz,

A. Nogales y

T.A. Ezquerro

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

Capítulo 6 PUBLICACIONES

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS

6.1.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

J. Fernando Barbero G., Iñaki Garay y Eduardo J. S. Villaseñor:
Exact Quantization of Einstein-Rosen Waves Coupled to Massless Scalar Matter.
Phys. Rev. Lett. **95**, 051301 (2005).

J. Fernando Barbero G., Guillermo A. Mena Marugán y Eduardo J. S. Villaseñor:
Asymptotics of Regulated Field Commutators for Einstein-Rosen Waves.
J. Math Phys. **46**, 062306 (2005).
Adicionalmente (por proceso de selección): Virtual Journal of Quantum Information **5** (2005).

Jerónimo Cortez y Guillermo A. Mena Marugán:
Feasibility of a Unitary Quantum Dynamics in the Gowdy T3 Model.
Phys. Rev. D **72**, 064020 (2005).

Pablo Galán y Guillermo A. Mena Marugán:
Length Uncertainty in a Gravity's Rainbow Formalism.
Phys. Rev. D **72**, 044019 (2005).

C. Gundlach, G. Calabrese, I. Hinder y J. M. Martín-García:
Constraint damping in the Z4 formulation and harmonic gauge.
Class. Quantum Grav. **22**, 3767-3773 (2005).

V. Timon, M. I. Suero, M. J. M. Delgado, V. Botella y A. Hernández-Laguna:
DFT critical points of the internal rotation potential energy surface and infrared spectra of the [H-1], [H-2] 2,5-pyrazinedicarboxamide.
J. Molecular Structure-Theochem **714**, 73 (1).

J. González and F. Guinea:
Localization of electronic states by fullerene charges in carbon nanotubes.
Phys. Rev. B **71**, 193409 (2005).

J. González:
Current instability and diamagnetism in small-diameter carbon nanotubes.
Phys. Rev. B **72**, 073403 (2005).

J. González and E. Perfetto:
Coulomb screening and electronic instabilities of small-diameter (5,0) nanotubes.
Phys. Rev. B **72**, 205406 (2005).

S. Bellucci, J. González and P. Onorato:
Crossover from Luttinger liquid to Coulomb blockade regime in carbon nanotubes.
Phys. Rev. Lett. **95**, 186403 (2005).

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

G. Ortiz, R. Somma, J. Dukelsky y S. Rombouts: Exactly-solvable models derived from a generalized gaudin algebra. Nucl. Phys. B **7070**, 401 (2005)

M. Jemai, P. Schuck, J. Dukelsky and R. Bennaceur : Self-consistent random phase approximation: Application to the Hubbard model with finite number of sites. Phys. Rev. B **71**, 085115 (2005)

Storozhenko, P. Schuck, T. Suzuki, H. Yabu y J. Dukelsky : Boson-fermion pairing in a boson-fermion environment. Phys. Rev. A **71**, 063617 (2005)

S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J.E. García-Ramos : Finite-size scaling exponents in the interacting boson model. Phys. Rev. C **72**, 011301 (2005)

J. E. García-Ramos, J. Dukelsky, and J. M. Arias: Beta⁴ potential at the U(5)-O(6) critical point of the interacting boson model. Phys. Rev. C **72**, 037301 (2005)

G. Ortiz y J. Dukelsky : BCS-to-BEC crossover from the exact BCS solution. Phys. Rev. A **72**, 043611 (2005)

D. S. Delion, P. Schuck, and J. Dukelsky : Self-consistent random phase approximation and the restoration of symmetries within the three-level Lipkin model. Phys. Rev. C **72**, 064305 (2005)

S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos: Continuous unitary transformations in two-level boson systems. Phys. Rev. C **72**, 064332 (2005)

A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, M.V. Ivanov, D.N. Kadrev, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J.M. Udías: Superscaling, Scaling Functions and Nucleon Momentum Distributions in nuclei. Phys. Rev. C **71**, 014317-1-11 (2005).

L. Zamick, A. Escuderos, S. J. Lee, A. Z. Mekjian, E. Moya de Guerra, A. A. Raduta, P. Sarriguren: Expressions for the number of J=0 pairs in even-even T_i isotopes. Phys. Rev. C **71**, 034317-1-9 (2005).

P. Sarriguren, R. Alvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra: Half-lives of rp-process waiting point nuclei. European Physical Journal A **24**, 193-198 (2005).

R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren: Isospin Mixing and Fermi Transitions: Selfconsistent Deformed Mean Field Calculations and Beyond. Phys. Rev. C **71**, 044308-1-9 (2005).

A.N. Antonov, D.N. Kadrev, M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J.M. Udías, V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, G.Z. Krumova: Charge and matter distributions and form factors of light, medium and heavy neutron-rich nuclei. Phys. Rev. C **72**, 044307-1-11 (2005).

P. Sarriguren, O. Moreno, R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra: Nuclear shapes dependence of Gamow-Teller distributions in neutron-deficient Pb isotopes. Phys. Rev. C **72**, 054317-1-10 (2005).
Hans O.U. Fynbo, Christian Aa. Diget, Uffe C. Bergmann, Maria J.G. Borge, Joakim Cederkäll, Peter Dendooven, Luis M. Fraile, Serge Franchoo, Valentin N. Fedosseev, Brian R. Fulton, Wenxue X. Huang, Jussi Huikari, Henrik Jeppesen, Ari S. Jokinen, Peter Jones, Björn Jonson, Ulrich Köster, Mikael Meiste, Thomas Nilsson, Göran Nyman, Yolanda Prezado, Karsten Riisager, Sami Rinta-Antila, Olof Tengblad, Manuela Turrión, Youbau Wang, Leonid Weissman, Katarina Wilhelmsen, Juha Äystö, and the ISOLDE

Collaboration: Revised rates for the stellar triple alpha process from new measurement of ^{12}C resonances. *Nature* 433, 133-139 (2005).

M. Turrión, L.M. Fraile, O. Tengblad; A diffusion-effusion database for the optimization of radioactive beams. *Defect and Diffusion Forum* 237-240, 201-205 (2005).

C. Aa. Diget, F.C. Barrer, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, V.N. Fedosseev, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, H.B. Jeppesen, B. Jonson, U. Köster, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, M. Turrión, K. Wilhelmson, J. Äystö: Properties of the ^{12}C 10 MeV state determined through Beta- decay. *Nucl. Phys. A* 760, 3-18 (2005)

H. Jeppesen, F. Ames, P. van den Bergh, U.C. Bergmann, G. Bollen, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, P. van Duppen, S. Emhofer, O. Forstner, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, J. Gómez-Camacho, D. Habs, R. von Hahn, G. Huber, M. Huuse, H.T. Johansson, B. Jonson, O. Kester, L. Liljeby, M. Meister, A.M. Moro, T. Nilsson, G. Nyman, M. Onionen, M. Pantea, H. Podlech, U. Ratzinger, K. Reisinger, K.G. Rensfelt, R. Repnow, K. Riisager, A. Richter, K. Rudolph, H. Scheit, A. Schempp, P. Schmidt, G. Schrieder, D. Schwalm, T. Sieber, H. Simon, O. Tengblad, M. Turrión, L. Weissmann, F. Wenander, B. Wolf, the ISOLDE and REX-ISOLDE collaborations: Low Energy Reactions with radioactive ions at REX-ISOLDE – the $^9\text{Li}+^2\text{H}$ case. *Nucl. Phys. A* 748, 374-393 (2005)

Tengblad, M. Turrión, L.M. Fraile: Targisol: an isol-database on the web. *The European Physical Journal A-Hadrons and Nuclei* 25, 763-764 (2005).

E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, y H.O.U. Fynbo: Anatomy of three-body decay I. Schematic models. *Nucl. Phys. A* 748, 27-38 (2005).

E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, y H.O.U. Fynbo: Anatomy of three-body decay II. Decay mechanism and resonance structure. *Nucl. Phys. A* 748, 39-58 (2005)

E. Garrido, D.V. Fedorov, y A.S. Jensen: Origin of three-body resonances. *European Physical Journal A* 25, 365-378 (2005).

N. Veglio, F. J. B, J. Gutierrez, J. M. Barandarian, A. Pena, M.A. González, P.P. Romano, and C. Mondelli: Experimental evidence of a cluster-glass transition on the colossal magnetoresistance manganite $\text{La}_{0.7}\text{Pb}_{0.3}$ ($\text{Mn}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$) O_3 . *Phys. Rev. B* 71, 212402 (2005).

F. J. Bermejo, C. Cabrillo, M.A. González, M.L. Saboungi: Orientationally Disordered Crystals as Benchmark Models to Understand the Low Temperature Anomalies of Glasses. *Journal of Low Temperature Physics* 139, 567 (2005).

F. J. Bermejo, K. Kinugawa, J. Dawidowski, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea: Beyond classical molecular dynamics: Simulation of quantum-dynamics effects at finite temperatures; the case of condensed molecular hydrogen. *Chem. Phys.* 317, 198 (2005).

Bustinduy, F.J. Bermejo, T.G. Perring, G. Bordel: A multiresolution data visualization tool for applications in neutron time-of-flight spectroscopy. *Nuclear Instruments and Methods A* 546, 498-508 (2005).

N. Veglio, F. J. Bermejo, L.C. Pardo, J. Ll. Tamarit, and G. J. Cuello: Direct experimental assessment of the strength of orientational correlations in polar liquids. *Phys. Rev. E* 72, 031502 (2005).

L. C. Pardo, N. Veglio, F. J. Bermejo, J. Ll. Tamarit, and G. J. Cuello: Experimental assessment of the extent of orientational short-range order in liquids. *Phys. Rev. B* 72, 014206 (2005).

F. J. Bermejo, I. Bustinduy, S. J. Levett, J. W. Taylor, R. Fernández-Perea y C. Cabrillo: Experimental evidence for the presence of nonacoustic excitations in molten Ga. *Phys. Rev. B* 72, 104103 (2005).

F. J. Bermejo, I. Bustinduy, C. Cabrillo, S. J. Levett, and J. W. Taylor: Comment on: Hard Sphere Dynamics in a non-hard spheres liquid. *Phys. Rev. Lett.* 95, 269601 (2005).

H.O.U. Fynbo, Ch. Aa Diget, U.C. Bergmann, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, P. Dendooven, L.M. Fraile, S. Franchoo, V. Fedosseev, B.R. Fulton, W. Huang, J. Huikari, H. Jeppesen, A.S. Jokinen, P. Jones, B.

Jonson, U. Köster, K. Langanke, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, M. Turrión, Y. Wang, L. Weissman, K. Wilhelmsen Rolander and J. Äystö: Revised rates for the stellar triple- α process from new measurement of ^{12}C resonances. *Nature* 433, 136-139 (2005)

H. B. Jeppesen, F. Ames, P. Van den Bergh, U.C. Bergmann, G. Bollen, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, P. Van Duppen, S. Emhofer, O. Forstner, L.M. Fraile, H.O.U. Fynbo, J. Gómez-Camacho, D. Habs, R. von Hahn, G. Huber, M. Huyse, H.T. Johansson, B. Jonson, O. Kester, L.Liljeby, M. Meister, A.M. Moro, T. Nilsson, G. Nyman, M. Oinonen, M. Pantea, H. Podlech, U. Ratzinger, K. Reisinger, K.G. Rensfelt, R. Repnow, K. Riisager, A. Richter, K. Rudolph, H. Scheit, A. Schempp, P. Schmidt, G. Schrieder, D. Schwalm, T. Sieber, H. Simon, O. Tengblad, E. Tengborn, M. Turrión, L. Weissman, F. Wenander and B. Wolf: Low energy reactions with radioactive ions at REX_ISOLDE-the $9\text{Li}+2\text{H}$ case. *Nucl. Phys. A* 748, 374-392 (2005)

B. Rubio, E. Nácher, A. Algora, M.J.G. Borge, L. Caballero, D. Cano-Ott, S. Courtin, Ph. Dessagne, D. Escrig, L.M. Fraile, W. Gelletly, A. Jungclaus, G. Le Scornet, F. Maréchal, Ch Miehé, E. Poirier J.L. Taín and O. Tengblad: Beta decay studies far from stability with the Total Absorption Technique: the case of ^{76}Sr . *Nucl. Phys. A* 752, 251c-254c (2005)

Y. Prezado, M.J.G. Borge, U.C. Bergmann, C.Aa. Diget, L.M. Fraile, B.R. Fulton, H.O.U. Fynbo, H. Jeppesen, B. Jonson, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, K. Riisager, O. Tengblad and K. Wilhelmsen: Low-lying resonance states in the ^9Be continuum. *Phys. Lett B* 618, 43-50 (2005).

L.V. Chulkov, H. Simon, I.J. Thompson, T. Aumann, M.J.G. Borge, Th.W. Elze, H. Emling, H. Geissel, L.V. Grigorenko, M. Hellström, B. Jonson, J.V. Kratz, R. Kulesa, K. Markenroth, M. Meister, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, V. Pribora, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, O. Tengblad and M.V. Zhukov: Three-body correlations in electromagnetic dissociation of Borromean nuclei: The ^6He case. *Nucl. Phys. A* 759, 23-42 (2005)

C.Aa Diget, F.C. Barker, Ch. U.C. Bergmann, M.J.G. Borge, J. Cederkäll, V.N. Fedosseev, L.M. Fraile, B. Fulton, H.O.U. Fynbo, H. Jeppesen, B. Jonson, U. Köster, M. Meister, T. Nilsson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, M. Turrión, K. Wilhelmsen and J. Äystö: Properties of the ^{12}C 10 MeV state determined through β -decay. *Nucl. Phys. A* 760, 3-18 (2005)

D. Cortina-Gil, J. Fernandez-Vazquez, T. Aumann, T. Baumann, J. Benlliure, M.J.G. Borge, L.V. Chulkov, U. Datta Pramanik, C. Forssén, L.M. Fraile, H. Geissel, J. Gerl, F. Hammache, K. Itahashi, R. Janik, B. Jonson, S. Mandal, K. Markenroth, M. Meister, X. Mocko, G. Münzenberg, T. Ohtsubo, A. Ozawa, Y. Prezado, V. Pribora, K. Riisager, H. Scheit, R. Schneider, G. Schrieder, H. Simon, B. Sitar, A. Stolz, P. Strmen, K. Sümmerer, I. Szarka and H. Weick: One-neutron knockout of ^{23}O . *Eur. Phys. J. A* 25, 343-346 (2005).

H. Mach, L.M. Fraile, O. Tengblad, R. Boutami, C. Jollet, W.A. Plóciennik, D.T. Yordanov, M. Staniou, M.J.G. Borge, P.A. Butler, J. Cederkäll, Ph. Dessagne, B. Fogelberg, H. Fynbo, P. Hoff, A. Jokinen, A. Korgul, U. Köster, W. Kurcewicz, F. Marechal, T. Motobayabshi, J. Mrazek, G. Neyens, T. Nilsson, S. Pdersen, A. Poves, B. Rubio, E. Ruchowska: New structure information on ^{30}Mg , ^{31}Mg and ^{32}Mg . *Eur. Phys. J. A* 25, S01, 105-109 (2005).

Giannatiempo, A. Perego, P. Sona, A. Nanini, H. Mach, B. Fogelberg, M.J.G. Borge, O. Tengblad, L.M. Fraile, A.J. Aas and K. Gulda: Spectroscopy and lifetime measurements of states in ^{76}Kr populated in ^{76}Rb decay. *Phys. Rev. C* 72, 044308-1-15 (2005).

H.H. Knudsen, H.O.U. Fynbo, M.J.G. Borge, R. Boutami, P. Dendooven, C.Aa Diget, T. Eronen, S. Fox, L.M. Fraile, B. Fulton, H. B. Jeppesen, A.S. Jokinen, B. Jonson, A. Kankainen, I. Moore, A. Nieminen, G. Nyman, H. Penttilä, K. Riisager, S. Rinta-Antila, O. Tengblad, Y. Wang, K. Wilhelmsen and J. Äystö: The β -decay of ^{13}O . *Phys. Rev. C* 72, 044312-1-5 (2005).

D. Cortina-Gil, J. Fernandez-Vazquez, T. Aumann, T. Baumann, J. Benlliure, M.J.G. Borge, L.V. Chulkov, U. Datta Pramanik, C. Forssén, L.M. Fraile, H. Geissel, J. Gerl, F. Hammache, K. Itahashi, R. Janik, B. Jonson, S. Mandal, K. Markenroth, M. Meister, X. Mocko, G. Münzenberg, T. Ohtsubo, A. Ozawa, Y. Prezado, V. Pribora, K. Riisager, H. Scheit, R. Schneider, G. Schrieder, H. Simon, B. Sitar, A.

Stolz, P. Strmen, K. Sümmerer, I. Szarka and H. Weick: Structure of neutron-rich oxygen isotopes. *J.Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 31, S1629-S1632 (2005).

A.M. Sánchez Benítez, D. Escribano, M.A.G. Álvarez, M.V. Andrés, C. Angulo, M.J.G. Borge, J. Cabrera, S. Cherubini, J.M. Espino, P. Figuera, M. Freer, J.E. García-Ramos, J. Gómez-Camacho, M. Gulino, O.R. Kakuee, I. Martel, C. Metelco, A.M. Moro, J. Rahighi, K. Rusek, D. Smirnov, O. Tengblad, P. Van Duppen and V. Ziman: Scattering of ^6He at energies around the Coulomb barrier. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 31, S1953-S1958 (2005).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

R. Escribano, D. Fernández and J.J. Sloan, “On the use of wavelet filtering and correlation techniques in atmospheric condensed phase spectroscopy”, *Spectrochim. Acta A*, 61, 1759 (2005).

I.K. Ortega, R. Escribano, V.J. Herrero, B. Maté and M.A. Moreno, “The structure and vibrational frequencies of crystalline HCl trihydrate”, *J. Mol. Struct.* 742, 147 (2005).

D. Fernández-Torre, R. Escribano, V.J. Herrero, B. Maté, M.A. Moreno and I.K. Ortega, “Theoretical calculations of refractive indices and optical effects in spectra of nitric acid and nitric acid monohydrate crystals”, *J. Phys. Chem. B*, 109, 18010 (2005).

N. Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero “Dynamics of the $\text{O}(^1\text{D})+\text{D}_2$ reaction: a comparison between crossed molecular beam experiments and quasiclassical trajectory calculations on the lowest three potential energy surfaces”. *Mol. Phys.* 103 (2005) 1703.

F. J. Aoiz, L. Bañares and V. J. Herrero “The $\text{H}+\text{H}_2$ Reactive System. Progress in the Study of the Dynamics of the Simplest Reaction”. *Int. Rev. Phys. Chem.* 24 (2005) 119

M. Castillo, I. Méndez, A. Islyaikin, V. J. Herrero, I. Tanarro “Low Pressure DC Air Plasmas. Investigation of Neutral and Ion Chemistry”, *J. Phys. Chem. A* 109 (2005) 6255.

G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Tanarro, I. Torres, J. E. Verdasco “Low temperature rotational relaxation of CO in self-collisions and in collisions with Ne and He”, *J. Phys. Chem. A* 109 (2005) 9402.

L. Bañares, F. J. Aoiz, T. González-Lezana , V. J. Herrero and I. Tanarro “Influence of Rotation and Isotope effects on the Dynamics of the $\text{N}(^2\text{D})+\text{H}_2$ Reactive System and of its Deuterated Isotopic Variants” , *J. Chem. Phys.* 123 (2005) 224301.

B. Maté, F. Thibault, G. Tejada, J. M. Fernández, y S. Montero: “Inelastic collisions in para- H_2 : Translation-rotation state-to-state rate coefficients and cross sections at low temperature and energy” *J. Chem. Phys.* 122(6), 064313-1–8 (2005).

G. Avila: “Ab initio dipole polarizability surfaces of water molecule: Static and dynamic at 514.5 nm”, *J. Chem. Phys.* 122 (14), 144310-1–10 (2005).

T. G. Elizarova, I. A. Shirokov, y S. Montero: “Numerical simulation of shock-wave structure for argon and helium”, *Phys. Fluids* 17 (6) 068101 (2005).

A. Ramos, J. M. Fernández, G. Tejada, y S. Montero: “Quantitative study of cluster growth in free jet expansions of CO_2 by Rayleigh and Raman scattering”, *Phys. Rev. A* 72, 053204-1–7 (2005).

J. Ortigoso y J. Santos: Orientation of Molecules with a Small Dipole Moment Using Cyclic Wave Packets. *Phys. Rev. A* 72, 053401 (2005).

6.1.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

- Javier R. Goicoechea, J. Martín-Pintado, J. Cernicharo: OH Rotational Lines as a Diagnostic of the Warm Neutral Gas in Galaxies. *Astrophys. J.* 619, 291G-296 (2005).
- C. Packham, J. T. Radomski, P.F. Roche, D.K. Aitken, E. Perlman, A. Alonso-Herrero, L. Colina, C.M. Telesco: The Extended Mid-Infrared Structure of the Circinus Galaxy. *Astrophys. J.* 618L, 17-20 (2005).
- Th. de Graauw, F.P. Helmich, J. Cernicharo, W. Wild, A. Baryshev, A. Bos, J.W. den Herder, A. Gunst, B. Jackson, H.J. van Langevelde, P. Maat, J. Martín-Pintado. and 6 coauthors: Exploratory submm space radio-interferometric telescope. *Advances in Space Research*, Volume 36, Issue 6, 1109-1113 (2005).
- J.R. Pardo, E. Serabyn, M.C. Wiedner, J. Cernicharo: Measured telluric continuum-like opacity beyond 1THz. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 96, iss. 3-4, 537-545 (2005).
- F. Daniel, M-L. Dubernet, M. Meuwly, J. Cernicharo, L. Pagani: Collisional excitation rate coefficients of N_2H^+ by He. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 363, Issue 4, 1083-1091 (2005)
- J.R. Pardo, J. Cernicharo, T.G. Phillips: Dissociative Shocks in the Neighborhood of Orion IRC2 Traced with Atomic Carbon. *Astrophys. J.* 634, L61-L64 (2005).
- E. Le Floch, C. Papovich, H. Dole, E.F. Bell, G. Lagache, G.H. Rieke, E. Egami, P.G. Pérez-González, A. Alonso-Herrero, M.J. Rieke, and 7 coauthors: Infrared Luminosity Functions from the Chandra Deep Field-South: The Spitzer View on the History of Dusty Star Formation at $0 < z < 1$. *Astrophys. J.* 632, 169-190 (2005).
- P.G. Pérez-González, G.H. Rieke, E. Egami, A. Alonso-Herrero, H. Dole, C. Papovich, M. Blaylock, J. Jones, M. Rieke, J. Rigby, and 4 coauthors: Spitzer View on the Evolution of Star-forming Galaxies from $z = 0$ to $z \sim 3$. *Astrophys. J.* 630, 82-107 (2005).
- Y. Shi, G.H. Rieke, D.C. Hines, G. Neugebauer, M. Blaylock, J. Rigby, E. Egami, K.D. Gordon, A. Alonso-Herrero: Far-Infrared Observations of Radio Quasars and FR II Radio Galaxies. *Astrophys. J.* 629, 88-99 (2005).
- J. Cernicharo, J. Crovisier : Water in Space: The Water World of ISO. *Space Science Reviews*, Volume 119, Issue 1-4, pp. 29-69 (2005).
- J. Martín-Pintado, I. Jiménez-Serra, A. Rodríguez-Franco, S. Martín, C. Thum: A New Intermediate-Mass Protostar in the Cepheus A HW2 Region. *Astrophys. J.* 628, L61-L64 (2005).
- J.R. Pardo, J. Cernicharo, J.R. Goicoechea: Observational Evidence of the Formation of Cyanopolynes in CRL 618 through the Polymerization of HCN. *Astrophys. J.* 628, 275-282 (2005).
- I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, S. Martín: Grain Evolution across the Shocks in the L1448-mm Outflow. *Astrophys. J.* 627, L121-L124 (2005).
- J.R. Rigby, G.H. Rieke, P.G. Pérez-González, J.L. Donley, A. Alonso-Herrero, J.-S. Huang, P. Barmby, G.G. Fazio: Why Optically Faint AGNs Are Optically Faint: The Spitzer Perspective. *Astrophys. J.* 627, 134-139 (2005).
- M.A. Hughes, D. Axon, J. Atkinson, A. Alonso-Herrero, C. Scarlata, A. Marconi, D. Batchelder, J. Binney, A. Capetti, C.M. Carollo, and 9 coauthors: Nuclear Properties of Nearby Spiral Galaxies from Hubble Space Telescope NICMOS Imaging and STIS Spectroscopy. *Astrophys. J.* 130, 73-83 (2005).
- J. Pety, D. Teyssier, D. Fossé, M. Gerin, E. Roueff, A. Abergel, E. Habart, J. Cernicharo: Are PAHs precursors of small hydrocarbons in photo-dissociation regions? The Horsehead case. *Astronomy and Astrophysics*, 435, 885-899 (2005).
- K.D. Gordon, G.H. Rieke, C.W. Engelbracht, J. Muzerolle, J.A. Stansberry, K.A. Misselt, J. E.

- Morrison, J. Cadien, E.T. Young, H. Dole, and 20 coauthors: Reduction Algorithms for the Multiband Imaging Photometer for Spitzer. *Astronomical Society of the Pacific*, 117, 503-525 (2005).
- J.W. Atkinson, J.L. Collett, A. Marconi, D.J. Axon, A. Alonso-Herrero, D. Batcheldor, J.J. Binney, A. Capetti, C.M. Carollo, L. Dressel, and 11 coauthors: Supermassive black hole mass measurements for NGC 1300 and 2748 based on Hubble Space Telescope emission-line gas kinematics. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 359, 504-520 (2005).
- J.J. Salzer, J.C. Lee, J. Melbourne, J.L. Hinz, Joannah A. Alonso-Herrero, A. Jangren: Metal Abundances of KISS Galaxies. IV. Galaxian Luminosity-Metallicity Relations in the Optical and Near-Infrared. *Astrophys. J.* 624, 661-679 (2005).
- B. Lefloch, J. Cernicharo, S. Cabrit, D. Cesarsky: Shock-induced PDR in the Herbig-Haro object HH 2. *Astronomy and Astrophysics*, 433,217-227 (2005).
- N. Marcelino, J. Cernicharo, E. Roueff, M. Gerin, R. Mauersberger: Deuterated Thioformaldehyde in the Barnard 1 Cloud. *Astrophys. J.* 620, 308-320 (2005).
- M. Krips, R. Neri, A. Eckart, D. Downes, J. Martín-Pintado, P. Planesas: Q0957+561 revised: CO emission from a disk at $z = 1.4$. *Astronomy and Astrophysics*, 431,879-886 (2005).
- S. Martín, J. Martín-Pintado, R. Mauersberger, C. Henkel, S. García-Burillo: Sulfur Chemistry and Isotopic Ratios in the Starburst Galaxy NGC 253. *Astrophys. J.* 620, 210-216 (2005)
- N.J. Rodríguez-Fernández, J. Martín-Pintado: ISO observations of the Galactic center interstellar medium. Ionized gas. *Astronomy and Astrophysics*, 429, 923-938 (2005).
- L. Colina, S. Arribas, A. Monreal-Ibero: Kinematics of Low- z Ultraluminous Infrared Galaxies and Implications for Dynamical Mass Derivations in High- z Star-forming Galaxies. *Astrophys. J.* 621, 725-737 (2005).
- M.L. Senent, M. Villa, F.J. Meléndez, R. Domínguez-Gómez: Ab Initio Study of the Rotational-Torsional Spectrum of Methyl Formate. *Astrophys. J.* 627, 567-576 (2005).
- M.L.Senent, M.Villa, A.Fernández-Clavero and R.Domínguez-Gómez: Ab initio study of the far infrared spectrum of glycine, *Int.J.Quant.Chem.*, 104, 551-561 (2005).
- B.García, S.Ibeas, J.M. Leal, F.Secco, M.Venturini, M.L. Senent, A. Niño y C. Muñoz-Caro: Conformations, Protonation Sites, and Metal Complexation of Benzohidroxamic Acid. A Theoretical and Experimental Study. , *Inorg.Chem.*, 44 (8), 2908-2919 (2005).
- M. Agúndez, D. Ruiz, S.Van Petegem, J. De Baerdemaeker, K.W. Chou, D. Segers y Y. Houbaert: Defect study on deformed Fe-Si alloys by positron annihilation techniques, *Physica Status Solidi A-Applications and Materials Science*, 202, 1751 (2005).
- J.R. Pardo, E. Serabyn, M.C. Wiedner:Broadband Submillimeter Measurements of the Full Moon Center Brightness Temperature and Application to a Lunar Eclipse, *Icarus* 178/1, 19-26 (2005)
- C. Prigent, E. Defer, J.R. Pardo, C. Pearl, W. Rossow, J.-P. Pinty: Relations of polarized scattering signatures observed by the TRMM Microwave Instrument with electrical processes in cloud systems, *Geophysical Journal Letters* 42, L04810-L04813 (2005)
- F. Karbou, L. Eymard, C. Prigent, and J.R. Pardo: Microwave land surface emissivity assessment using AMSU-B and AMSU-A measurements. *IEEE Geos. and Remote Sensing* 43/5, 948- 959 (2005).
- L. Pagani, J.R. Pardo, A.J. Apponi and A. Bacmann: L183 Revisited-III : the gas depletion. *Astronomy and Astrophysics*, 429, 181-192 (2005).

M.A. Urbaneja, A. Herrero, R.-P Kudritzki, F. Najarro, S.J. Smartt, J. Puls, D.J. Lennon, L.J. Corral: Blue Luminous Stars in Nearby Galaxies: Quantitative Spectral Analysis of M33 B-Type Supergiant Stars, *Astrophys. J.* 635, 311-335 (2005).

J. Moultaqa, A. Eckart, R. Schödel, T. Viehmann, F. Najarro: VLT L-band mapping of the Galactic center IRS 3-IRS 13 region. Evidence for new Wolf-Rayet type Stars, *Astronomy and Astrophysics*, 443, 163-173 (2005).

M.R. Mokiem, A. de Koter, J. Puls, A. Herrero, F. Najarro, M.R. Villamariz: Spectral analysis of early-type stars using a genetic algorithm based fitting method, *Astronomy and Astrophysics*, 441, 711-733(2005)

C.J. Evans, S.J. Smartt, J.-K Lee, D.J. Lennon, A. Kaufer, P.L. Dufton, C. Trundle, A. Herrero, S. Simón-Díaz, A. de Koter, F. Najarro and 15 coauthors: The VLT-FLAMES survey of massive stars: Observations in the Galactic clusters NGC 3293, NGC 4755 and NGC 6611. *Astronomy and Astrophysics*, 437, 467-482 (2005).

M.A. Urbaneja, A. Herrero, F. Bresolin, R.-P. Kudritzki, W. Gieren, J. Puls, N. Przybilla, F. Najarro, G. Pietrzynski: On the alpha-Element Abundance Gradients in the Disk of the Sculptor Spiral Galaxy NGC 300. *Astrophys. J.* 622, 862-877 (2005)

D.F. Figer, F. Najarro, T.R. Geballe, R.D. Blum, R.P. Kudritzki: Massive Stars in the SGR 1806-20 Cluster. *Astrophys. J.* 622, L49-L52 (2005).

F. Najarro: Estrellas Masivas en el Centro Galáctico, *Boletín de la Sociedad Española de Astronomía*, nº 13, 19-35 (2005) 200

6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

P. Carmona, E. Monleón, M. Monzón, J. J. Badiola, J. Monreal. Título: In-vivo detection of scrapie cases from blood by infrared spectroscopy. *Journal of General Virology* , 86, 3425-3431 (2005). Índice de impacto: 3,32.

A. Herrero, P. Carmona, M. L. García, M. T. Solas, M. Careche. Ultrastructural changes and structure and mobility of myowater in frozen-stored hake (*Merluccius merluccius* L.) muscle: relationship with functionality and texture. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 53, 2558-2566 (2005). Índice de impacto: 2,33.

A. Macagnano, M. Careche, A. Herrero, R. Paolesse, E. Martinelli, G. Pennazza, P. Carmona, A. D'Amico, C. Di Natale. A model to predict fish quality from instrumental features. *Sensors and Actuators B*, 111-112, 293-298 (2005). Índice de impacto: 2,08.

I. Sánchez, P. Carmona, M. Careche. Estudio de la adición de fibra dietética de trigo en las propiedades reológicas y estructurales de geles de surimi. *Nutrición Hospitalaria*, 20-S1, 134-135 (2005).

S. Murcia-Mascarós, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, M. V. Cañamares y J. V. García-Ramos. Spectroscopic Identification of Alizarin in a Mixture of Organic Red Dyes by Incorporation in Zr-ORMOSIL. *Journal of Raman Spectroscopy* 36, 420-426 (2005).

T. de los Arcos, M. G. Garnier, P. Oelhafen, D. Mathys, J. W. Seo, C. Domingo, J. V. Garcia- Ramos y S. Sanchez-Cortes. In situ assessment of carbon nanotube diameter distribution with photoelectron spectroscopy. *Physical Review B* 71, 205416 (2005).

O. Francioso, S. Sánchez-Cortés, G. Corrado, P. Gioacchini y C. Ciavatta. Characterization of Soil organic Carbon in Long-term Amendment Trials. *Spectroscopy Letters* 38(3), 283-291(2005).

M. V. Cañamares, S. Sánchez-Cortés, J. D. Gómez-Varga, C. Domingo y J. V. García-Ramos. Comparative Study of the Morphology, Aggregation, Adherence in Glass and SERS activity of Silver Nanoparticles Prepared by Chemical Reduction of Ag⁺ Using Citrate and Hydroxylamine. *Langmuir* 18,

8546-8553 (2005).

P. Leyton, S. Sánchez-Cortés, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y C. Saitz. Surface Enhanced Micro-Raman Detection and Characterization of Calix[4]Arene-Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) Host-Guest Complexes. *Applied Spectroscopy* 59, 1009-1015 (2005).

P. Leyton, S. Sánchez-Cortés, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y C. Saitz. Surface Enhanced Vibrational (IR and Raman) Spectroscopy in the Design of Chemosensors based on Ester Functionalised *p-tert*-Butylcalix[4]arene Hosts. *Langmuir* 21(25), 11814-11820 (2005).

R. F. Aroca, R. A. Alvarez-Puebla, N. Pieczonka, S. Sanchez-Cortes, J.V. Garcia-Ramos. Surface-enhanced Raman Scattering on Colloidal Nanostructures. *Advances in Colloid and Interface Science* 116(1-3), 45-61(2005).

J. A. Sánchez-Gil y A. A. Maradudin: Surface-plasmon polariton scattering from a finite array of nanogrooves/ridges: Efficient mirrors, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 251106 (2005)

L. Díaz, M. Santos, C. Ballesteros, J. Pola: IR laser induced carbon-coated iron nanoparticles embedded in polymer. *J. Mat. Chem.*, 15, 4311-4317(2005).

M. Santos, L. Diaz, M. Urbanova, D. Pokorná, Z. Bastl, J. Subrt, J. Pola: IR laser-induced process for chemical vapor deposition of polyselenocarbosilane films. *J. Anal. Appl. Pyrol.* En la Web desde 28 de Diciembre de 2005.

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

6.2 LIBROS Y MONOGRAFÍAS

6.2.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

J. Fernando Barbero G. “Introduction to General Relativity”, en **Proceedings of the XIII Fall Workshop on Geometry and Physics**, Publicaciones de la Real Sociedad Matemática Española (España). ISBN: 84-933610-6-2.

J. Fernando Barbero G., Guillermo A. Mena Marugán y Eduardo J. S. Villaseñor. “Perturbative and non-perturbative quantum Einstein-Rosen Waves”, en **Proceedings of the XIII Fall Workshop on Geometry and Physics**, Publicaciones de la Real Sociedad Matemática Española (España). ISBN: 84-933610-6-2.

6.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

J. Dukelsky and S. Pittel. “Exactly Solvable Richardson-Gaudin Models, Including Generalizations and Applications”, en **Nuclear Theory: Proceedings of the XXIII International Workshop on Nuclear Theory**, Heron Press (Sofia, Bulgaria). ISBN: 954-580-170-5.

J.R.Vignote, R. Álvarez-Rodríguez, C.Fernández-Ramírez, E. Garrido, E. Moya de Guerra, P.Sarriguren, J.M.Udías. “Past, present and future of A(e,e'p)B experiments”, en **Nuclear Theory'23, XXIII International Workshop on Nuclear Theory**, Heron Press Ltd (Sofia, Bulgaria). ISBN: 954-580-170-5.

L. Zamick, A. Escuderos, S.J. Lee, A. Mekjian, E. Moya de Guerra, A.A. Raduta, P. Sarriguren. “Expressions for the number of pairs of a given angular momentum in the single j-shell model”, en **Key Topics in Nuclear Structure**, World Scientific Publishing Co. (Singapore). ISBN 981-256-093-9.

E. Garrido, D.V. Fedorov, A.S. Jensen y [H.O.U.](#) Fynbo. “Decay Mechanisms for Three-body Resonances”, en **Few-Body problems in physics: The 19th European Conference on Few-Body Problems in Physics**, AIP Conference Proceedings, 768, American Institute of Physics (USA). ISBN: 0-7354-0253-1.

E. Garrido, D.V. Fedorov y A.S. Jensen. “Three-body Resonances: Spectrum of Two Nucleon Halo Nuclei”, en **Few-Body problems in physics: The 19th European Conference on Few-Body Problems in Physics**, AIP Conference Proceedings 768, American Institute of Physics (USA). ISBN: 0-7354-0253-1.

A.S. Jensen, D.V. Fedorov, H.O.U. Fynbo y E. Garrido. “Three-body decay of many body resonances”, en **Reaction mechanisms for rare isotope beams**, AIP Conference Proceedings 791, American Institute of Physics (USA). ISBN: 0-7354-0280-9.

M Turrión, O. Tengblad, M. Madurga, M. Alcorta, U. Köster et al. “**Proceedings of the 2nd Interdisciplinary TARGISOL WinterSchool**” (CD-ROM). Editores: M. Turrión, CERN (Suiza). ISBN: 9290832436

A.N. Antonov, M. K. Gaidarov, D.N. Kadrev, M.V. Ivanov, E. Moya de Guerra, J. M. Udías. “Superscaling in Nuclei beyond the Relativistic Fermi Gas Model” en **Advances in Nuclear and Related Areas**, Art of Text Publishing & Graphics Arts Co. Tesalónica (Grecia). ISBN: 960-243-613-1.

J.W. Kim, F.J. Bermejo, M.L. Ristig, J.W. Ciark. "Momentum Distribution in Liquid Para-Hydrogen" en **Condensed Matter Theorie Vol. 19**, Nova Science Publishers (New York). ISBN:1-59454-308-9.

J. Gómez-Camacho, M. Alvarez, A. Moro, I. Martel, A. Sánchez-Benítez, D.Escrig, J.M.G. Borge “Is the optical model valid for the scattering of exotic nuclei?” en **Reaction Mechanism for rare Isotope Beams**, AIP Conference Proceedings 791, 146-153, American Institute of Physics (USA). ISBN:0-7354-0280-9

6.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

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

6.3 TESIS DOCTORALES

6.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Aspectos Dinámicos del Comportamiento Colectivo en Líquidos Simples y de las Transiciones de Fase en Sistemas Reentrantes. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Junio 2005. Sobresaliente "cum laude" por unanimidad.

Doctorando: **Arantxa Maira Vidal**
Director: **Francisco Javier Bermejo Barrera**

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

"Estudio teórico de sistemas de relevancia atmosférica: espectroscopía IR de cristales de ácido nítrico y sus hidratos", , Fac. de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, , 2005, Sobresaliente cum laude (Tesis con formato europeo)

Doctorando: **Delia Fernández Torres**
Director: **Rafael Escribano**

6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

Doctorando/a: **Sandra Martín Rauseo**
Directores: **J. Martínez-Salazar y J.F. Vega**

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

Doctorando: **Alejandro Sanz Parras**
Directores: **T.A. Ezquerro y A. Nogales**

6.4 TESINAS DE LICENCIATURA

6.4.1 DPTO. DE FÍSICA Y QUÍMICA TEÓRICAS

DIPLOMA DE ESTUDIOS AVANZADOS (DEA):
Incertidumbre mínima y escalas invariantes en gravedad cuántica.

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 4 de octubre.

Diplomado: **Pablo Galán.**

Director: **Guillermo A. Mena Marugán.**

6.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Estudio de la Desintegración β^+ del núcleo ^{72}Br . Facultad de Física, Universidad Autónoma de Madrid, 10 de octubre 2005. Sobresaliente 10.

Tesinando: **Miguel Madurga Flores**

Director: **M^a José García Borge**

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

“Transferencia intermolecular de energía en expansiones supersónicas de monóxido de carbono diluido en hidrógeno molecular”. Memoria de introducción a la investigación correspondiente al diploma de estudios avanzados (DEA) realizado en la Facultad de Química de la Universidad Complutense de Madrid y en el Instituto de Estructura de la Materia (CSIC). Presentada en la Universidad Complutense de Madrid en Julio de 2005.

Tesinanda: Judith Durá Díez

Director: Supervisión conjunta Luis Bañares y Víctor J. Herrero

6.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Propiedades Físico-Químicas del centro de nuestra Galaxia. Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 27 de Mayo. Sobresaliente.

Tesinando: Miguel Angel Requena Torres

Director: Jesús Martín-Pintado Martín

Barrido Espectral sobre Orion KL. Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Mayo 2005. Sobresaliente.

Tesinanda: Belén Tercero Martínez

Director: José Cernicharo Quintanilla

Estudio espectroscópico ab initio del radical C4. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, 10 de julio. Sobresaliente.

Tesinanda: Helena Massó González

Director: María Luisa Senent Díez

Espectroscopía de Campo integral de Galaxias Infrarrojas Ultraluminosas a bajo y alto desplazamiento al rojo: El caso de IRAS16007+3743. Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Autónoma de Madrid, Marzo 2005.

Tesinanda: Macarena García Marín

Directores: Luis Colina Robledo

Santiago Arribas Mocoroa

Estudio de las Propiedades Físicas del Anillo Circunuclear de NGC7469, Universidad Complutense de Madrid, Sobresaliente

Tesinando: Tanio Díaz Santos

Directores: Almudena Alonso Herrero – Luis Colina Robledo

6.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Síntesis y Caracterización de Materiales Compuestos Basados en Poliolefinas Metalocénicas y

Caucho Reciclado. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 8 de julio.
Sobresaliente

Tesinanda: **Maria Teresa Expósito Espinosa**
Directores: **J. Ramos Díaz y J.F. Vega**

**SEMANA DE LA CIENCIA. INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA. CSIC.
MADRID 7 AL 20 DE NOVIEMBRE DE 2005.**

DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Dra. M^a José García Borge
“El núcleo un viaje al centro de la Materia”
Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 8 de noviembre de 2005

DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Dra. Isabel Tanarro
“Plasmas: El cuarto estado natural de la materia”
Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 15 de noviembre de 2005

DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Dr. Francisco Najarro, Prof. Jesús Martín-Pintado, Prof. José Cernicharo, Dr. Luis Colina
“Evolución química del Universo: de los átomos a las moléculas complejas y a la vida”
Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 7 de noviembre de 2005

DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Dr. Pedro Carmona
“Visualización de moléculas biológicas por espectroscopía infrarroja y Raman”
Semana de la Ciencia, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid 10 de noviembre de 2005

PATENTES

NÚMERO DE PATENTE: 200501977

MODALIDAD: nacional

PAIS: España (país de prioridad).

FECHA SOLICITUD: 20-7-2005

FECHA CONCESION: en curso

FECHA DE RETIRADA:

TÍTULO: Celda porta-muestras para el estudio de intercambio isotópico H/D e interacciones moleculares por espectroscopía infrarroja de transmisión y sus aplicaciones

SITUACIÓN: Primer año de prioridad

TITULAR: Consejo Superior de Investigaciones Científicas; Universidad Complutense de Madrid

NOMBRE: P. Carmona, A. Rodríguez-Casado, M. Molina