



MEMORIA
DE LA LABOR REALIZADA
DURANTE EL
AÑO 2006
EN EL
INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE
LA MATERIA
DEL
CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

INTRODUCCIÓN

El Instituto de Estructura de la Materia (IEM) trata de ser un moderno y ambicioso Instituto de Investigación firmemente incluido en el CSIC y altamente visible no sólo en él, sino también en España, en Europa y en el mundo entero. Con una reputación de excelencia, este Instituto intenta también ser atractivo para estudiantes, investigadores y visitantes.

El IEM fue fundado en 1976, con la unión de algunos investigadores en Física de Partículas, Física Molecular, Química Cuántica y Polímeros Cristalinos. Con la llegada de nuevos científicos y con los cambios experimentados por algunas líneas de investigación, las actividades científicas del IEM han ido incluyendo otras áreas como la Física Nuclear, la Espectroscopía Molecular o la Gravitación.

Las actividades de investigación están organizadas alrededor de seis Departamentos con grupos experimentales y teóricos cuyos campos científicos abarcan la Astrofísica, la Física Nuclear, Estadística, Molecular y Macromolecular, la Biofísica, la Física de la Materia Condensada y la Física Gravitacional. Parte de esta investigación utiliza grandes instalaciones nacionales e internacionales. La actividad investigadora se concentra en el área de la Física, aunque con aplicaciones en Química Física y, colateralmente, en moléculas de interés biológico.

En 1976, los científicos en plantilla del Instituto eran sólo cinco. En la actualidad, acoge a cuarenta y cuatro investigadores en plantilla distribuidos en los siguientes Departamentos:

- Química y Física Teóricas (QFT),
- Física Nuclear y Física Estadística (FNFE),
- Física Molecular (FM),
- Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR),
- Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos (EVPM),
- Física Macromolecular (FMM).

Además, el Instituto cuenta con 11 doctores vinculados, 18 investigadores postdoctorales, 39 becarios predoctorales y 11 titulados contratados. El personal de apoyo se compone de 17 miembros, distribuidos entre los seis Departamentos citados anteriormente y la Unidad de Gestión Económica-Administrativa. En total, el personal del IEM asciende a 129 personas.

Desde 1994, el IEM pertenece al Centro de Física Miguel Antonio Catalán (CFMAC). Los Servicios de Biblioteca, Almacén, Mantenimiento, Proyectos y Delineación, Talleres y Conserjería son prestados por el CFMAC y compartidos con los otros Institutos que forman dicho Centro.

La misión del IEM, recogida en su Plan de Actuación para el quinquenio 2005-2009, es contribuir al avance del conocimiento en las principales líneas de investigación del Instituto, generar sinergias entre los distintos grupos de investigación que lo componen, aprovechando su carácter multidisciplinar y sus enfoques teórico/experimental y de ciencia básica y aplicada, y contribuir a la formación de personal científico en las distintas etapas de la carrera investigadora. La visión del IEM es convertirse en un instituto de referencia internacional en la frontera de la investigación científica representada por las líneas de investigación que en él se desarrollan.

La actividad científica realizada durante 2006 ha quedado plasmada en 178 publicaciones en revistas del SCI. A esto hay que añadir la consecución de ocho tesis doctorales y la dirección de siete tesis de licenciatura y diplomaturas de estudios avanzados.

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

DIRECCIÓN

Director: Prof. José Vicente García Ramos

Vicedirector: Dr. Juan Ortigoso Martínez

Gerente: Dña. Pilar Criado Escribano

JUNTA DE INSTITUTO

Presidente: Prof. José Vicente García Ramos

Secretaria: Dña. Pilar Criado Escribano

Vocales:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Dra. Concepción Domingo Maroto

Dr. Jorge Dukelsky Bercovich

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Dra. M^a José García Borge

Dr. José González Carmona

D. Miguel Ángel Moreno Alba

Dr. Juan Ortigoso Martínez

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Dra. Magna Santos Greve

CLAUSTRO CIENTÍFICO

Presidente: Prof. José Vicente García Ramos

Secretario: Dr. Eduardo Garrido Bellido

Personal Investigador en Plantilla:

Dr. Fernando Ania García

Dr. Santiago Arribas Mocoroa

Dr. Jesús Fernando Barbero González

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera

Prof. Dionisio Bermejo Plaza

Dr. Carlos Cabrillo García

Dra. M^a Esperanza Caglio Escotado

Dra. M^a José Capitán Aranda

Dr. Pedro Carmona Hernández

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Dr. Luis Colina Robledo

Dr. Víctor Cruz Cañas

Dr. Luis M. Díaz Sol

Dr. José Luis Doménech Martínez

Dra. Concepción Domingo Maroto

Prof. Jorge Dukelsky Bercovich

Prof. Rafael Escribano Torres

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Dra. Araceli Flores Aguilar Amat

Dr. José M. Fernández Sánchez

Dra. M^a José García Borge

Dr. José González Carmona

Dr. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Prof. Jesús Martín-Pintado Martín

Dr. Francisco Najarro de la Parra

Dra. Belén Maté Naya

Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascañana
Prof. Salvador Montero Martín
Dr. Juan Ortigoso Martínez
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dr. Julio Francisco Santos Gómez
Dra. Magna Santos Greve
Dr. Pedro Sarriguren Suquibide
Dra. M^a Luisa Senet Díez
Dra. Isabel Tanarro Onrubia
Dr. Guzmán Tejeda Gala
Dr. Olof E. I. Tengblad

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Jefe del Departamento:

Dr. José González Carmona

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Dr. Jesús Fernando Barbero González
Dr. Guillermo Antonio Mena Marugán
Dr. José María Martín García
Dr. Jerónimo Cortez Quezada
Dr. Enrico Perfetto
Dr. Luis Garay Elizondo
Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor
D. David Brizuela Cieza
D. Iñaki Garay Elizondo
D. Daniel Gómez Vergel
D. Pablo Galán Sánchez

Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado I3P
Becario Postdoctoral
Becario Postdoctoral
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Becario Predoctoral CAM
Becario Predoctoral FPU
Becario Predoctoral I3P
Becario Postgrado I3P

DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Jefe del Departamento:

Dra. M^a José García Borge

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Prof. Javier Bermejo Barrera
Prof. Jorge Dukelsky Bercovich
Dr. Pedro Sarriguren Suquibide
Dr. Olof Erik Tengblad
Dr. Carlos Cabrillo García
Dr. Eduardo Garrido Bellido
Dr. Ricardo Fernández Perea
Dr. Sergio Adrián Lerma Hernández
Dr. Armando Relano Pérez
Dra. Manuela Turrión Nieves
Dr. Carlos Esebbach Benchimol

Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Investigador Científico
Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Becario Postdoctoral MEC
Investigador Contratado (Juan de la Cierva)
Investigador Contratado I3P
Doctor Vinculado

Dr. Luis Mario Fraile Prieto
Profª. Elvira Moya Valgañón (E. Moya de Guerra)
Dra. Aranzazu Maira Vidal
Dña. Eva Reillo Sánchez
D. Javier Rodríguez Vignote
D. Martín Alcorta Moreno
D. Ibón Bustinduy Uriarte
D. Raúl de Diego Martínez
D. Ricardo Domínguez Reyes
Dña. Beatriz Errea Subero
Dr. César Fernández Ramírez
D. Miguel Madurga Flores
D. Óscar Moreno Díaz
D. Mikel Sanz Ruiz
Dra. Raquel Álvarez Rodríguez
D. Ángel Perea Martínez
D. Rafik Boutami
D. Diego Escrig Forano

Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Contratado TSIL desde 09/2006
Contratado TSIL
Contratado a proyecto UE
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI de CAM
Becario Predoctoral UA
Becario Predoctoral FPU
Becario Predoctoral MEC
Becario Predoctoral I3P
Becario Postgrado
Técnico Especializado G. Medio
Autorizado Permanencia
Autorizado Permanencia

Personal de apoyo:

Dña. Purificación Corchete Corchete

Auxiliar I+D+I

DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Jefe del Departamento:

Dr. Julio Francisco Santos Gómez

Científico Titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Prof. Dionisio Bermejo Plaza
Prof. Rafael Escribano Torres
Prof. Salvador Montero Martín
Dra. Concepción Domingo Maroto
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. Guzmán Tejada Gala
Dr. Raúl Z. Martínez Torres
Dr. Ángel Ramos Gallardo
Dr. Óscar Gálvez González
Dña. Laura Gómez Martín
D. Juan Hernández Morilla
Dña. Beatriz Martín Llorente
Dña. Isabel Méndez Sánchez
Dr. Ismael Keneth Ortega Colomer
Dña. Verónica Verdejo Patón

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Investigador Científico
Investigador Científico
Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado I3P
Investigador Contratado I3P
Investigador Contratado (Juan de la Cierva)
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral CAM
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral UA
Becario Predoctoral CSIC-PIF

Personal de apoyo:

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

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's
Ayudante de Investigación
Contratado I3P
Contratado I3P

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
Dr. Santiago Arribas Mocoora
Dr. Luis Colina Robledo
Dra. María Luisa Senent Díez
Dr. Francisco Najarro de la Parra
Dra. Almudena Alonso Herrero
Dr. Juan Ramón Pardo Carrión
Dra. Carmen Sánchez Contreras
Dra. Rosa Domínguez Gómez
Dr. Arturo Rodríguez Franco
D. Fabrice Dayou
D. Luis Díez Merino
Dña. Laura Díez Merino
D. David Hurtado Bouza
D. Álvaro Labiano Ortega
D. Eduardo Sánchez Suárez
D. Marcelino Agúndez Chico
Dña. Julia Alfonso Garzón
Dña. Arancha Amo Baladrón
D. Tanio Díaz Santos
D. José Pablo Fonfría Expósito
Dña. Macarena García Marín
Dña. Izaskun Jiménez Serra
Dña. Helena Massó González
D. Miguel Ángel Requena Torres
Dña. Belén Tercero Martínez
Dña. Lucie Vincent

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación
Investigador Científico (desde 09/2006)
Investigador Científico
Investigador Científico
Científico Titular
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado
Titulado Superior Contratado (desde 09/2006)
Titulado Superior Contratado
Titulado Superior Contratado I3P
Titulado Superior Contratado
Titulado Superior Contratado (desde 05/2006)
Titulado Superior Contratado
Becario Predoctoral FPU
Becario Predoctoral FPI (desde 10/2006)
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral I3P
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral Marie Curie (desde 09/2006)

Personal de apoyo:

D. Marcelo Castellanos Beltrán
Dña. Alicia Fernández Clavero

Gestor Proyecto ASTROCAM
Ayudante de Investigación

DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Jefe del Departamento:

Dra. Magna Santos Greve

Científico Titular

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Profa. Juana Bellanato Fontecha
Dr. José Vicente García Ramos
Dr. Pedro Carmona Hernández
Dr. Luís Díaz Sol
Dr. Santiago Sánchez Cortés
Dr. José Antonio Sánchez Gil
Dra. M^a Rosa López Ramírez

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación (Vinculado ad Honorem)
Profesor de Investigación
Investigador Científico
Científico Titular
Científico Titular
Científico Titular
Investigador Contratado I3P (desde 05/2006)

Dra. M^a Aranzazu Rodríguez Casado
Dra. Marina Molina Santos
Dr. Juan Alberto Torresano Escobosa
Dr. Gabriel Martínez Niconoff
Dra. M^a Vega Cañamares Arribas

D. Vincenzo Giannini
D. Luca Guerrini
Dña. Zuzana Jurasekova

Investigador Contratado I3P
Doctor Vinculado
Doctor Vinculado (hasta 11/ 2006)
Estancia Sabática (desde 10/2006)
Becario Predoctoral (hasta 02/2006)
Contratado con cargo a Proyecto (07-10/2006)
Becario Predoctoral CAM
Becario Predoctoral I3P
Contratado Predoctoral Marie Curie
“Early Stage Training”

Personal de apoyo:

Dña. Raquel Ambrona Sánchez
Dña. María Luisa López Gil
Dña. Ana Magro Carrillo

Auxiliar Administrativo
Ayudante de Investigación
Contratado I3P (desde 09/2006)

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del Departamento:

Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:

Prof. Francisco José Baltá Calleja
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana
Dr. Daniel R. Rueda Bravo
Dr. Fernando Ania García
Dra. María Esperanza Cagiao Escotado
Dra. María José Capitán Aranda
Dr. Victor Cruz Cañas
Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat
Dra. Amelia Linares Dos Santos
Dra. M^a Cruz García Gutiérrez
Dra. Aurora Nogales Ruiz
Dr. Juan Francisco Vega Borrego
Dra. M^a Teresa Expósito Espinosa
D. Jaime Javier Hernández Rueda
Dra. Sonia Martínez Hedo
Dña. Nuria Robledo Álvaro
D. Jon Otegui de la Fuente

Escala o Categoría:

Profesor de Investigación
Profesor de Investigación
Investigador Científico
Científico Titular
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Investigador Contratado (Ramón y Cajal)- Dr.Vinculado
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPI
Becario Predoctoral FPU
Becario Predoctoral con cargo a Proyecto
Becario Postgrado I3P

Personal de apoyo:

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

Titulado Superior Especializado
Ayudante de Investigación

UNIDAD DE GESTIÓN ECONÓMICA-ADMINISTRATIVA

Dña. Pilar Criado Escribano
Dña. M^a Teresa Burriel Barceló
Dña. Ana María García Arribas
Dña. M^a Carmen García Collado
Dña. Concepción Nieto Serrano
Dña. Isabel Lombán Botello

Gerente - Ayudante de Investigación
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's [CFMAC]
Ayudante de Investigación
Cuerpo General Auxiliar Administración del Estado
Cuerpo Técnico Auxiliar de Informática
Auxiliar Organismos Autónomos Administrativo

SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN

ALMACÉN

Dña. M^a Jesús Puado Villalba

Ayudante de Investigación OPI's

BIBLIOTECA

Dña. Isabel Mendoza García
Dña. Pilar Arangüena Pernas
Dña. Margarita Martínez Álvarez
D. Cristobal Pozo Molina

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's
E. Administrativa de OOAA
Administrativo

CENTRALITA

Dña. Encarnación García-Alcañiz Fernández
Dña. M^a Paz Sánchez-Beato Dorado

Auxiliar Servicios Generales
Auxiliar Servicios Generales

CONSERJERÍA

D. Eduardo Balbas Utrillas
D. Félix Ibáñez Salmerón
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes
Subalterno OOAA
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

INFORMÁTICA

D. Jorge Álvarez Copo
D. Javier López Renau
D. Carlos Meneses Jiménez

I3P (Técnico Medio Área Téc. Mant., desde 16/9/2006)
Ayudante de Investigación (hasta 1/11/2006)
I3P (Técnico Medio Área Téc., Mant. y Ofic. G.2,
hasta 18/5/2006)

MANTENIMIENTO

Dña. Belén Palero Fernández
D. David Fernández Rioja
Dña. Gema Heras Juaristi

D. José María Sanz Pastor

Ayudante de Investigación OPI's
I3P (Técnico Activ. Téc. Mant. GP4, desde 16/9/2006)
I3P (Técnico Medio Área Téc., Mant. y Ofic. G2,
hasta 11/4/2006)
Oficial de Activ. Técnicas y Profesionales.

PROYECTOS Y DELINEACIÓN

D. Andrés de Frutos Gómez
D. José Granados Valenzuela

Titulado Técnico Especializado
Ayudante de Investigación

PUBLICACIONES Y REPROGRAFÍA

D. Julián Gil Risco

Oficial Activ. Técnicas y Profesionales

TALLER MECÁNICO

D. Benito Morales Guillén
D. José María Prieto Zardón
D. Ignacio Sanz Gómez

Técnico Especialista de Grado Medio OOPP
Técnico Subalterno 2^a (hasta 31/1/2006)
Ayudante de Investigación OOPP (hasta 26/07/2006)

TALLER ÓPTICO

D. José Lasvignes Pacheco

Técnico Superior de Activ. Técnicas de Mant. y Profes.

CAPÍTULO 2
LABOR INVESTIGADORA

2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Teórica: Gravitación.
- Teoría de la Materia Condensada.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Relatividad General Clásica y Cuántica.
- Métodos computacionales en Física Gravitacional.
- Agujeros negros y análogos en Materia Condensada.
- Sistemas de electrones fuertemente correlacionados.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Física Teórica y Matemática.
- Métodos computacionales.

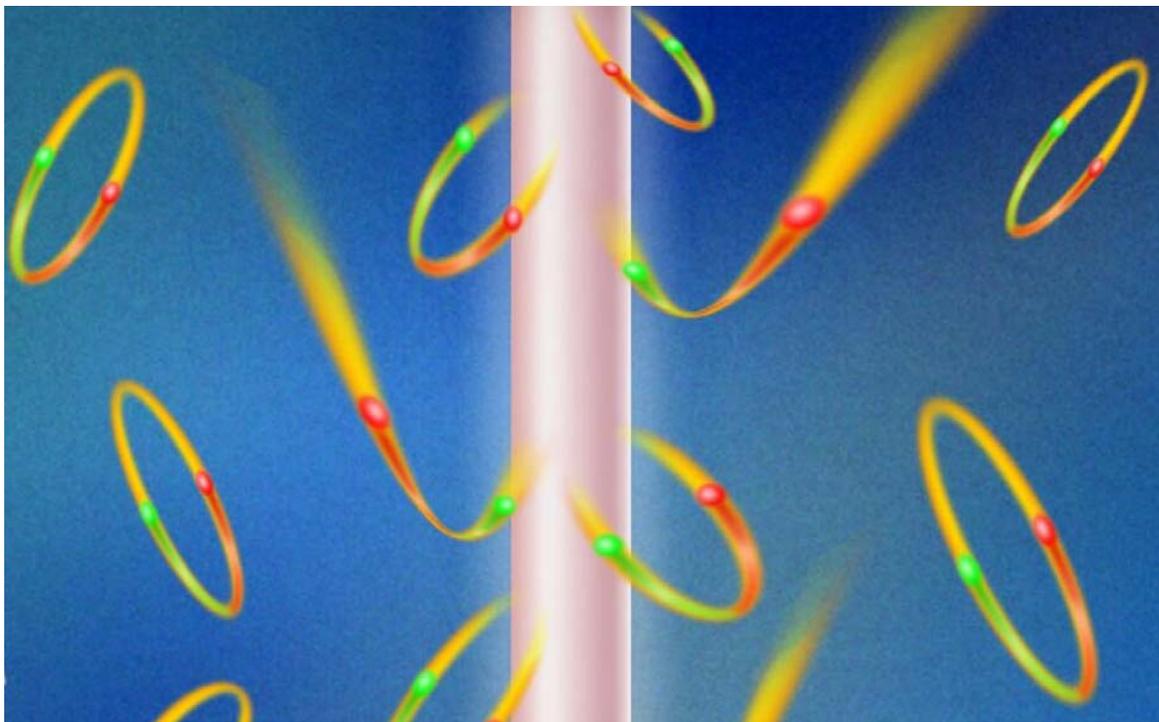


Imagen pictórica de la radiación Hawking.

LABOR INVESTIGADORA

- Gravitación: cosmología cuántica, escalas invariantes, relatividad numérica y análogos de agujeros negros.

Durante el año 2006 se ha continuado trabajando con éxito en las líneas ya tradicionales del grupo en física gravitacional y cosmología: cuantización de modelos gravitatorios con inhomogeneidades obtenidos por reducción de simetría a partir de Relatividad General, estudio de la emergencia de escalas invariantes y de límites de resolución espaciotemporal en gravedad cuántica, formalismos de horizontes aislados y dinámicos, análogos de agujeros negros en materia condensada y aplicación de formalismos geométricos y de física matemática a la relatividad numérica.

En el área de la cosmología cuántica, nuestro trabajo se ha centrado en la aplicación de la teoría cuántica de campos a modelos en Relatividad General en los que la simetría reduce las complicaciones de la teoría

general, pero aún así permite la existencia de grados de libertad locales en el campo gravitatorio. Hemos analizado en detalle el caso de las cosmologías de Gowdy, universos en expansión a partir de una singularidad inicial que contienen ondas gravitatorias con polarización lineal y cuyas secciones espaciales son compactas. Como resultado de esta investigación, hemos construido una teoría cuántica consistente para describir dichos universos y tal que la evolución resulta venir dada por una transformación unitaria (que preserva la norma de los estados cuánticos). La cuantización se ha alcanzado empleando una representación de Fock para el campo escalar que describe los grados de libertad de las ondas gravitatorias. Ésta es la primera descripción cuántica consistente existente en la literatura de un modelo en Relatividad General con soluciones cosmológicas que contengan inhomogeneidades.

Además, hemos demostrado que la cuantización propuesta es en realidad la única cuantización de Fock aceptable para el modelo de Gowdy (salvo equivalencias) si se exige que la dinámica cuántica sea unitaria y que cierta simetría homogénea que presenta el sistema se implemente como simetría cuántica. Este resultado da gran solidez a las posibles predicciones físicas de la cuantización construida, ya que no son consecuencia de elegir una descripción cuántica particular de entre un sinfín de teorías cuánticas para las cosmologías de Gowdy. Parte de la continuación de este trabajo consiste en explorar precisamente estas implicaciones y consecuencias físicas, entre ellas las relacionadas con el estudio de fluctuaciones (inhomogéneas) en cosmología.

Por otra parte se ha desarrollado un formalismo, basado en métodos utilizados en la cuantización de sistemas de osciladores armónicos con frecuencia dependiente del tiempo, que permite la obtención de los operadores de evolución unitaria para este tipo de reducciones de simetría, en particular los modelos de Gowdy, en forma analítica y cerrada. Aparte de proporcionar un marco alternativo en el que estudiar la unitariedad de la evolución cuántica en estos sistemas, la posibilidad de contar con expresiones analíticas permite plantearse la cuantización exacta mediante otro tipo de aproximaciones, en concreto las representaciones de tipo polimérico para campos escalares. Para ello será necesario obtener representaciones apropiadas para los operadores que aparecen como factores en el operador de evolución. Dado que éstos son exponenciales de objetos cuadráticos en los campos y sus momentos canónicamente conjugados parece ciertamente factible el análisis de las propiedades algebraicas de estos objetos y su posible representación como operadores con las propiedades adecuadas en un espacio de Hilbert.

En lo referente a la cuantización de las ondas de Einstein-Rosen, uno de los temas de trabajo tradicionales en el departamento se ha avanzado de manera notable en la obtención de predicciones de tipo físico para este sistema. En concreto se ha explotado la posibilidad de acoplar campos escalares sin masa para utilizarlos de manera efectiva como objetos de prueba con los que explorar la geometría cuantizada del modelo. En este sentido es destacable el análisis que se ha realizado sobre los propagadores -funciones de dos puntos del campo escalar- que admiten la interpretación de amplitudes de probabilidad de que un cuanto del campo creado en un suceso espacio-temporal concreto sea detectado en otro suceso distinto. La imagen así obtenida sobre los efectos de una cuantización del sistema gravitación-materia acoplado refuerza los resultados obtenidos mediante el análisis de la microcausalidad en este modelo y, en particular, los efectos cuánticos que aparecen en el eje de simetría. Quizá la herramienta más precisa que se ha introducido para llevar a cabo el tipo de análisis descrito anteriormente es la introducción de estados de tipo Newton-Wigner que permiten la introducción de funciones de onda normalizables que pueden ser interpretadas como amplitudes de probabilidad exactas de que partículas creadas a una cierta distancia del eje de simetría en un cierto instante de tiempo sean detectadas a otra distancia en un instante posterior. La posibilidad de analizar estas funciones de onda en gran detalle mediante el uso de las técnicas asintóticas introducidas en trabajos previos sobre este tema permite determinar bajo que circunstancias se puede obtener trayectorias espacio-temporales susceptibles de ser interpretadas como trayectorias clásicas del sistema. De esta manera podemos analizar en detalle como surgen las propiedades geométricas clásicas que caracterizan las geometrías pseudoriemannianas que caracterizan la relatividad general clásica.

En lo que respecta al estudio de límites de resolución temporal y espacial 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). Para implementar estas teorías en el espacio de posiciones existen diferentes propuestas. Un conjunto de ellas se basa en efectuar una implementación canónica. Esta implementación conduce a una geometría que depende *directamente* de la energía y momento del sistema. Se llega así al formalismo llamado arco iris gravitatorio. Nosotros hemos demostrado que las diferentes propuestas de implementación canónica de relatividad doblemente especial aparecidas en la literatura son en realidad equivalentes. Además, hemos estudiado la

alteración de las expresiones usuales del segundo principio generalizado de la termodinámica y de la temperatura y entropía de agujeros negros de Schwarzschild en el marco de arco iris gravitatorio. Hemos mostrado que la entropía deja de ser proporcional al área del agujero negro. Este hecho lleva a una definición de temperatura con un comportamiento muy diferente a la temperatura de Hawking convencional. La nueva temperatura no tiene por qué divergir cuando la masa del agujero negro se hace muy pequeña. Este resultado es importante porque sugiere que los agujeros negros podrían detener su evaporación o emplear un tiempo infinito en el proceso, abriendo nuevas posibilidades para la solución del problema de pérdida de información.

En lo concerniente a relatividad numérica, hemos generalizado a órdenes superiores el formalismo de Gerlach-Sengupta, elaborado inicialmente para el tratamiento a primer orden de las perturbaciones de un fondo esféricamente simétrico. Para ello se han tenido que generalizar los armónicos esféricos tensoriales de Gerlach-Sengupta a un número arbitrario de índices en la esfera. Utilizando técnicas de representaciones irreducibles del grupo de rotación se ha obtenido una fórmula cerrada para los productos de armónicos. El formalismo obtenido está optimizado para su implementación en un programa de cálculo tensorial simbólico, ya que dada la complejidad y longitud de las ecuaciones, se hace inevitable su uso. Nosotros lo hemos implementado en el paquete xTensor para Mathematica, del que somos autores. Como aplicación de las herramientas obtenidas se han calculado, por primera vez en la literatura, las fuentes completas para las ecuaciones de evolución a segundo orden perturbativo en el gauge de Regge-Wheeler. También se han obtenido las ecuaciones de conservación de energía-momento, comprobando, de esta manera, que las fuentes de las ecuaciones de evolución son consistentes con la identidad de Bianchi. La única propiedad que le falta a nuestro formalismo para que sea una generalización completa del de Gerlach y Sengupta a órdenes superiores es formularlo de manera invariante gauge. De este punto nos estamos ocupando actualmente.

Este año se ha completado nuestro estudio de las inestabilidades inherentes a las diversas formulaciones actualmente en uso en relatividad numérica. Estas inestabilidades tienen tres posibles orígenes: incorrectas condiciones de contorno, violaciones de las ligaduras y gauges mal puestos. En 2004 desarrollamos la técnica de condiciones de contorno *constraint-preserving* para resolver el primer problema; en 2005 introdujimos la técnica de *constraint-damping* para resolver el segundo (lo que permitió por primera vez una evolución estable de una binaria de agujeros negros), y este año 2006 hemos clasificado y analizado los diferentes gauges en uso en nuestra comunidad, señalando cuáles son problemáticos y sugiriendo cuáles son los mejores para la estabilidad de las evoluciones. Para ello también ha sido esencial el uso de nuestra herramienta xTensor de cálculo tensorial intensivo.

Finalmente, en temas 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.

- Propiedades de transporte en materiales de carbono de baja dimensionalidad.

La investigación se ha centrado durante el año 2006 en el estudio de las propiedades electrónicas de láminas de grafito (grafeno) y nanotubos de carbono. La motivación por dicha investigación surge de la aparición de importantes resultados experimentales durante los últimos años, mostrando fenómenos notables en dichos materiales. Así, la posibilidad de separar láminas individuales de grafito ha permitido a varios grupos experimentales la medición de propiedades de transporte no convencionales, entre las que se encuentran la cuantización de la conductividad, que parece estar siempre por encima de un valor umbral, y la aparición de escalones típicos del efecto Hall cuántico en medidas de la magnetoresistencia, con una cuantización de la conductividad Hall en valores semienteros que es característica de los fermiones de Dirac.

Nuestro trabajo ha empezado por estudiar la formación de los niveles de Landau en redes de carbono en dos dimensiones, para investigar cómo los efectos del campo magnético se ven modificados por la curvatura de la red y, en particular, por el cambio de geometría en el caso de los nanotubos de carbono. Partiendo de modelos de enlace fuerte que describen los orbitales π del carbono, la diagonalización del hamiltoniano correspondiente ha permitido encontrar la degeneración de los niveles, así como los estados

de frontera que dan lugar a la cuantización de la conductividad en el efecto Hall. Estos resultados se han comparado con las teorías de campos efectivas obtenidas en el límite al continuo, a partir del acoplo entre el potencial vector electromagnético y los fermiones de Dirac que describen las cuasipartículas en el grafeno. De esta manera se ha llegado a una mejor comprensión de los efectos no convencionales que surgen de la invariancia de tipo relativista de las excitaciones electrónicas de baja energía en las redes de carbono.

En el caso de nanotubos de carbono de gran radio en campos magnéticos suficientemente intensos, se ha mostrado en particular que las propiedades de transporte están gobernadas por estados localizados en los flancos del nanotubo, que son responsables de la aparición de corrientes cuantizadas en la dirección longitudinal. Esto ha abierto la posibilidad de observar la cuantización de la conductividad Hall en nanotubos multicapa, donde típicamente la capa más externa es la única contactada por los electrodos en los experimentos de transporte. Se ha propuesto así un diseño experimental donde los escalones en la conductividad Hall se verían reflejados en las medidas del voltaje en la sección transversal del nanotubo, que podrían llevarse a cabo en particular mediante un microscopio de barrido por efecto túnel.

En otro apartado, se ha profundizado también en la investigación de la superconductividad de los nanotubos multicapa. A este respecto, ha despertado gran interés la observación de caídas abruptas en la resistencia de nanotubos multicapa por parte de un grupo experimental en Japón, que ha reportado temperaturas de transición del orden de 12K. En general, hemos podido constatar que la aparición de correlaciones superconductoras es posible en nanotubos donde la interacción de Coulomb se encuentra suficientemente apantallada. Esto sucede cuando hay un acoplo entre cargas de un número muy grande de canales de conducción, como en el caso de los nanotubos multicapa convenientemente dopados, donde pueden aparecer un número muy grande de sub-bandas al nivel de Fermi. Notablemente, nuestras predicciones parecen concordar con el hecho de que el mencionado grupo experimental haya observado caídas abruptas de la resistencia únicamente en muestras donde la mayor parte de las capas están contactadas por los electrodos.

En las investigaciones de superconductividad, hemos desarrollado un método que permite describir las inestabilidades electrónicas de nanotubos multicapa dopados. Nuestra técnica de cálculo reposa en la dependencia en la escala de energía de los diferentes procesos de interacción, y ha hecho posible el estudio de la transición del estado metálico normal de los nanotubos (líquido de Luttinger) a un estado superconductor a baja temperatura. Se ha establecido en particular que la coherencia tridimensional necesaria para éste último se abre a través de la transmisión de pares de Cooper por efecto túnel entre las diferentes capas de la estructura concéntrica del nanotubo multicapa. De esta manera, se ha construido el diagrama de fases en función del radio y del dopado de los nanotubos en dicha estructura. Se ha podido concluir que las predicciones dentro de nuestro marco teórico están de acuerdo con las observaciones experimentales, determinándose en última instancia las configuraciones óptimas que pueden permitir alcanzar mayores temperaturas de transición al estado superconductor.

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.
- Transporte de calor en materia desordenada.
- Dinámica de baja frecuencia en medios desordenados.
- Desarrollo de instrumentación para fuentes de neutrones de última generación.
- Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- 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.
- Investigación y desarrollo de detectores y sistemas para partículas cargadas y radiación gamma.

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 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 de dos clases de fermiones: protones y neutrones, y por tener una interacción fuerte y compleja. Sin embargo, en los últimos años, hemos realizado progresos hacia la definición de un procedimiento eficiente para cálculos de estructura en núcleos medianos. Durante el año 2006 hemos trabajado en el desarrollo de un programa de computación basado en el procedimiento DMRG con conservación de la simetría rotacional. Dada la complejidad de este proyecto, esperamos obtener los primeros resultados a lo largo del 2007.

Por otro lado, desarrollamos un nuevo procedimiento DMRG para el tratamiento de hamiltonianos no hermíticos en el marco del modelo de capas de Gamow. El modelo de capas de Gamow permite el tratamiento de núcleos débilmente ligados mediante la inclusión de resonancias y del continuo no resonante. En un primer trabajo, hemos demostrado la gran precisión del método para tratar núcleos livianos no ligados como el ${}^7\text{He}$.

- Modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Durante el año 2006 hemos realizado 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 la elaboración 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. Para el caso fermiónico, encontramos una nueva representación de $su(2)$ en términos de pares con momento de centro de masa finito. Esta nueva realización del álgebra nos permitió explorar el diagrama de fases de especies fermiónicas en redes ópticas de dos dimensiones y determinar regiones donde la fase de Larkin-Ovchinnikov-Fulde-Ferrer es estable.

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 ${}^{64}\text{Ge}$ en espacios de valencia con dimensiones mucho mayores que las que pueden ser tratadas con grandes diagonalizaciones. Analizamos también otras álgebras de rango 2, como el álgebra no compacta $so(3,2)$ que representa pares bosónicos de dos clases, y el álgebra $su(3)$ que tiene una realización física en conjuntos de átomos de tres niveles.

-Transiciones de fase cuánticas.

Las transiciones de fase cuánticas representan cambios estructurales en el estado fundamental del sistema como función de un parámetro de control, que generalmente es un acoplamiento del Hamiltoniano. En sistemas finitos estos cambios son suaves y solamente extrapolando al límite termodinámico se puede definir estrictamente una transición de fase. Sin embargo, cambios en la estructura y propiedades del estado fundamental de sistemas como el núcleo atómico son observables y a su estudio se han dedicado recientemente muchos esfuerzos.

Durante el último año hemos desarrollado un modelo de 2 bosones escalares cuyo diagrama de fases es análogo al del modelo nuclear de bosones interactuantes. Con este modelo, que se puede resolver exactamente para un gran número de bosones, es posible estudiar con mucho detalle su diagrama de fases y

las propiedades de las transiciones. También hemos verificado desarrollos en la inversa del número de bosones, que luego hemos utilizado en el modelo nuclear más general.

- 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 espín-isospín tratadas en la aproximación QRPA, hemos abordado diferentes problemas de interés en Estructura Nuclear, Astrofísica Nuclear y Física de Partículas.

En particular, hemos estudiado los efectos de la deformación nuclear en las distribuciones energéticas de Gamow-Teller correspondientes a isótopos de Hg, Pb y Po deficitarios en neutrones. Analizando en primer lugar las energías de los diferentes isótopos frente a la deformación nuclear, se ha encontrado que el fenómeno de coexistencia de forma es bastante general en esta región y en particular en isótopos de Pb se ha encontrado una triple coexistencia esférica/oblada/prolada, tal y como se observa experimentalmente. Si bien las energías relativas de las distintas formas nucleares son muy sensibles a los parámetros del modelo, la existencia de estas formas y sus deformaciones de equilibrio son muy estables.

Las distribuciones de Gamow-Teller calculadas para cada una de estas formas muestran que las diferencias observadas debidas a la deformación nuclear son mucho más importantes que las debidas a otros efectos, tales como la fuerza de Skyrme o la fuerza de *pairing* usadas. Esto nos permite establecer estos patrones de desintegración beta como una signatura de la deformación nuclear que puede inferirse simplemente observando el modo en el que el núcleo se desintegra.

Se han estudiado también las reacciones de intercambio de carga de tipo (p,n) y (n,p) en isótopos estables e inestables de xenon. El interés de este estudio radica, por un lado, en que el isótopo ^{136}Xe ha sido elegido como el primer blanco en movimiento en colisiones con gas de hidrógeno para comprobar las posibilidades de este tipo de experimentos en EXL-FAIR. Predicciones teóricas para estas secciones eficaces son por tanto necesarias. Por otro lado, los isótopos de xenon en esta región son de especial interés para la doble desintegración beta, dado que algunos de estos isótopos están involucrados como candidatos a padres o a hijos en estos procesos. Se han realizado predicciones para las distribuciones de intensidad Gamow-Teller, identificando las regiones energéticas donde se espera la máxima concentración de intensidad para cada uno de los isótopos estudiados.

- *Scaling* y *superscaling* en dispersión inclusiva de electrones por núcleos.

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.

El modelo se ha extendido para considerar también las funciones de *scaling* para núcleos medios y pesados con N distinto de Z, para los cuales las densidades de protones y neutrones son claramente diferentes. La asimetría de la función de *scaling* cuasielástica en el modelo CDFM se ha introducido simulando fenomenológicamente los efectos que violan esta simetría, que incluyen en particular la interacción de estados finales. El análisis se ha extendido a la región de la Delta donde se produce la mayor contribución a la dispersión inelástica, obteniendo un acuerdo con el experimento muy satisfactorio. Finalmente, las propiedades de *superscaling* para dispersión de electrones se han utilizado para predecir el comportamiento de las secciones eficaces neutrino-núcleo con intercambio de carga que son comparadas con las predicciones de los modelos basados en aproximación de gas de Fermi relativista.

- Transporte de calor en materia desordenada.

El hecho de que la conductividad térmica de los vidrios a temperaturas intermedias muestre universalidades cuantitativas constituye, según A.J. Leggett, uno de los principales problemas abiertos en Física de la

Materia Condensada. Las actividades dentro de esta línea de investigación son fruto de una colaboración establecida con el Instituto Verkin de Física e Ingeniería de las Bajas Temperaturas en Kharkov, Ucrania.

Los primeros resultados a los que tal colaboración ha dado lugar han sido recientemente publicados como Rapid Communication (PRB 74, 060201 [2006]) y muestran, más allá de cualquier duda, la similitud en el transporte de calor en un medio sólido totalmente desordenado y en el mismo material en forma de cristal con desorden puramente orientacional. En contraste, la fase ordenada muestra la signatura característica de un medio policristalino, mostrando no solo una conductividad térmica que es un orden de magnitud mayor que la del mismo material en estado desordenado, sino que su dependencia con la temperatura es fácilmente entendible en términos de procesos que involucran la dispersión de las excitaciones elementales que transportan calor (fonones) por inhomogeneidades de diversa naturaleza. La sorprendente proximidad entre la curva que muestra la dependencia con la temperatura del vidrio y del cristal desordenado muestra que la ausencia de desorden posicional apenas tiene efecto en fenómenos tan sensibles a la propagación de excitaciones acústicas. Los resultados muestran pues que los cristales con desorden orientacional han de ser considerados dentro del comportamiento universal encontrado para el transporte térmico en vidrios, y por tanto contradicen aseveraciones aparecidas en la literatura reciente.

- Dinámica de baja frecuencia en medios desordenados.

Los resultados más remarcables conciernen a la detección por medios puramente experimentales de excitaciones colectivas de tipo óptico (es decir que no involucran oscilaciones de densidad) en un fluido cercano al punto de congelación (PRL 96, 235501 [2006]). Este tipo de excitaciones han sido exploradas durante ya algunas décadas por medio de Espectroscopía Neutrónica en sales fundidas, sin haber llegado a resultados convincentes. Si bien la presencia de excitaciones de este tipo en algunos materiales, como el fluoruro de deuterio líquido, ha sido predicha desde hace tiempo a partir de simulaciones por ordenador, la verificación experimental de tales predicciones ha tenido que aguardar al desarrollo de metodologías de purificación, contención y almacenamiento de muestras altamente reactivas. Los resultados obtenidos han sido fruto de una colaboración con la Universidad de Tennessee (Knoxville) que nos ha permitido abordar experimentalmente el estudio de este material.

Otros estudios remarcables conciernen a la detección de excitaciones colectivas en un semiconductor como es el Te (PRB 73, 094201 [2006]), el efecto de confinamiento espacial sobre la propagación de excitaciones colectivas en deuterio líquido (PRB 73, 094206 [2006]), y un estudio sobre el espectro de excitaciones en nanotubos de carbono (PRB 73, 075425 [2006]).

En temáticas algo diferentes, merece la pena remarcar el estudio en profundidad sobre la distribución de momento en para-hidrógeno líquido y su comparación con resultados derivados por aplicación de técnicas adaptadas para el tratamiento de problemas de muchos cuerpos (PRB 73, 144203 [2006]).

- Desarrollo de instrumentación para fuentes de neutrones de última generación.

Las actividades dentro de este epígrafe conciernen a la colaboración R.A.L.ISIS- M.E.C. por la cual la participación española en esta gran instalación experimental se realiza "en especie" mediante el suministro de diversos componentes, tanto para la futura Segunda Fuente de Blanco (ISIS-TSII), como mediante la colaboración en desarrollos futuros referentes a máquinas de última generación.

Durante el año en curso se han llevado a cabo labores de diseño y construcción de varios componentes para instrumentos en construcción en ISIS-TSII, y también se han comenzado a dar los primeros pasos en tecnologías de aceleración. A tal efecto, se ha comenzado una colaboración con el *Accelerator Science and Technology Center* (ASTeC), radicado en CCLRC (*Rutherford Appleton Lab.*), la cual involucra nuestra participación activa en la construcción de equipamiento necesario para las primeras fases de aceleración de haces de iones intensos para su posterior empleo como inyectores en instalaciones futuras, como la Fuente Europea de Espalación o la construcción de la Factoría de Producción de Neutrinos en el Reino Unido.

- 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, y más específicamente en la distribución de energía de los fragmentos resultantes de dicha desintegración. En particular, durante este año hemos avanzado en el estudio de sistemas en los que la interacción coulombiana es relevante. El estudio de las resonancias y distribuciones de energía en sistemas como el ${}^6\text{Li}$ o el ${}^6\text{Be}$ abre la puerta a la resolución del problema de Coulomb para sistemas de tres partículas. A pesar de que la forma analítica del comportamiento asintótico de la función de onda de tres cuerpos no es conocida, los métodos numéricos desarrollados son suficientemente precisos a largas distancias como para obtener resultados fiables, incluso cuando la interacción de Coulomb está presente.

Otro de los aspectos investigados se refiere a las huellas de los estados de Efimov en los sistemas resonantes de tres partículas. Cuando las condiciones para la aparición de estados ligados de Efimov se satisfacen, las distribuciones de energía después de la desintegración de las resonancias presentan también un comportamiento característico.

- Caracterización de estados nucleares relevantes en procesos de nucleosíntesis estelar.

En la 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]. Hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados.

Continuando en la misma línea hemos estudiado los niveles excitados de baja energía de ${}^9\text{Be}$ relevantes en el cálculo de la reacción ${}^4\text{He}(\alpha, \gamma){}^9\text{Be}$ 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 múltiples 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 espín a este estado en ${}^9\text{Be}$ y otros para los que no había ninguna evidencia experimental (Phys. Scripta, 2006). 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 literatura como secuencial a través de ${}^8\text{Be}$, o en ruptura directa sin pasar por ninguna resonancia binaria (M. Madurga et al., PoS(NIC-IX) 154). 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 ${}^{11}\text{Li}$ (${}^9\text{Li}$ +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 así 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 constituyó el trabajo de investigación para el DEA de M. Alcorta, presentado en diciembre de 2006, y aparece en M. Alcorta et al., PoS(NIC-IX)067. Además, durante este año hemos repetido el experimento aumentando la energía del haz de ${}^3\text{He}$ hasta 4.5 MeV, lo que permite explorar nuevos canales de reacción. También se ha aumentado la granularidad del sistema experimental, lo que permitirá determinar los espines y paridades de los estados poblados en ${}^{12}\text{C}$ y ${}^9\text{B}$ mediante el estudio de las correlaciones angulares. Estos resultados se han presentado en dos conferencias: *Nuclei in the Cosmos* (Ginebra, Suiza) y *Radioactive Nuclear Beams* (Cortina d'Ampezo, Italia).

- Estudio de la polarizabilidad de núcleos con halo.

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

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

Nuestro objetivo es hacer un estudio experimental y teórico de la dispersión de los núcleos con halo a energías próximas a la barrera coulombiana. Nuestro objetivo final es determinar el efecto de polarizabilidad dipolar, que consiste en la distorsión que sufren los núcleos durante la colisión debido a los campos eléctricos. Este efecto debe ser particularmente grande en núcleos con halo y se debe manifestar como una reducción de la sección eficaz en ángulos grandes. Este proyecto se lleva a cabo en colaboración con grupos de las Universidades de Sevilla y Huelva con los que tenemos unidades asociadas. El primer objetivo fue estudiar ${}^6\text{He}$ en el CRC de Bélgica, y posteriormente extender el estudio a ${}^{11}\text{Li}$ en TRIUMF (Canadá) y ${}^{11}\text{Be}$ en REX-ISOLDE (CERN). Para estos últimos, las propuestas de experimentos están aprobadas y el primer test del ${}^{11}\text{Be}$ se hizo en noviembre, confiando en realizar las medidas finales a lo largo de 2007.

En el *Cyclotron Research Center* (CRC) de Louvain-la-Neuve (Bélgica) hemos medido este efecto estudiando reacciones de un haz del núcleo con halo ${}^6\text{He}$ sobre un blanco de Pb con el objeto de determinar el comportamiento de la sección eficaz elástica a ángulos grandes para energías entorno a la barrera coulombiana (PH189 y PH215). El estudio realizado a energías por debajo, próximas, y por encima de la barrera nos permiten comprobar si el modelo óptico es una aproximación útil, y determinar los aspectos fundamentales de los potenciales que deben utilizarse para estos núcleos exóticos. Se hizo un experimento en noviembre de 2002 y otro un año más tarde. Diego Escrig ha realizado el análisis de datos correspondientes a los canales no elásticos de la reacción. Se ha determinado la dependencia de las secciones eficaces elástica y de ruptura ($\alpha+2n$) con la energía para valores por debajo y por encima de la barrera coulombiana, así como su dependencia angular. Los resultados obtenidos indican que las secciones eficaces elásticas eran parcialmente debidas a la polarizabilidad dipolar de ${}^6\text{He}$ en el campo coulombiano (Nucl. Phys. A, enviado). La distribución de fragmentos hacia atrás indica que el canal de reacción dominante es la transferencia de dos neutrones (debido a la estructura de halo) a estados excitados del blanco próximos al continuo (D. Escrig et al., Nucl. Phys. A, enviado).

- I+D en detectores para Física Nuclear Experimental.

Considerando que el cumplimiento de los grandes desafíos de Física Nuclear depende de sus infraestructuras, nuestro grupo ha dedicado una parte significativa de su tiempo a investigación y desarrollo (I+D) en detectores de partículas cargadas y electrónica (analógica y digital) con el objetivo de bajar significativamente los umbrales de detección de partículas cargadas, crucial en procesos de desintegración beta y estudio de reacciones de interés astrofísico.

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 ésta conlleva. Se está estudiando la viabilidad de identificar las diferentes partículas mediante un análisis de la señal digital con redes neuronales artificiales. Este trabajo lo inició Carlos Pascual y se ha continuado con la estancia en nuestro grupo de John Macgrath (Universidad de York, Reino Unido) y Hans Henrik Knudsen (Universidad de Aarhus, Dinamarca), quienes han puesto a punto el osciloscopio digital y programado toda la digitalización de la señal. En test experimentales que se realizarán en los tándem del CMAM (UAM, Madrid) y CNA (Sevilla) se testearán distintos preamplificadores que permitan obtener señales suficientemente rápidas.

La segunda línea de trabajo, enmarcada dentro de la colaboración R3B (*Reactions with Relativistic Radioactive Beams*) de 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. El detector deberá ser capaz de medir la energía total de las gammas, así como multiplicidades y la energía individual. Para cumplir con las especificaciones de este proyecto, se han realizado simulaciones del comportamiento de materiales centelladores de nueva generación, LYSO (Lu-Y-Si-O) y haluros de lantano (La-Br-Ce o La-Cl-Ce). Los primeros resultados nos permiten avanzar que se pueden conseguir resoluciones de hasta un 3-4% en la determinación de la energía incidente de partículas cargadas con esta combinación de materiales. Con los programas desarrollados empleando el código GEANT4 podremos simular la respuesta de diferentes geometrías con los materiales elegidos y elegir el diseño del detector. Paralelamente se han

montado prototipos con los que llevar a cabo pruebas para la caracterización de las propiedades y respuesta de los mismos a partículas y radiación electromagnética.

2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Física Molecular de atmósferas y plasmas.
- Fluidodinámica Molecular.
- Espectroscopía Láser.
- Física Molecular Teórica.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Físico-Química de la atmósfera. Espectroscopia IR de hielos de interés atmosférico.
- Cinética de plasmas fríos a baja presión. Aplicaciones ionosféricas y en recubrimientos de películas carbonadas.
- Dinámica y cinética de reacciones químicas y de procesos de transferencia de energía.
- Espectroscopía Raman en chorro supersónico.
- Agregados de hidrógeno molecular.
- Agregados de CO₂.
- Transferencia energía R-T en colisiones moleculares inelásticas.
- Ensanchamiento colisional en moléculas de interés atmosférico o en procesos de combustión.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas de relevancia en procesos atmosféricos.
- Control Cuántico Molecular.
- Alineamiento y orientación molecular.
- Espectroscopía Molecular Teórica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Espectroscopía IR de transmisión y absorción-reflexión. Cálculos de primeros principios de sólidos cristalinos.
- Reactores de descarga en cátodo hueco para generación de plasmas fríos. Espectrometría de masas de iones y especies neutras. Espectroscopia de emisión visible. Sondas de Langmuir. Microbalanza.
- Haces moleculares supersónicos. Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI). Cálculos dinámicos.
- Espectroscopía Raman Lineal. Chorros supersónicos. Criogenia.
- Espectroscopía Raman Estimulada.
- Doble resonancia Raman-Raman.
- Espectroscopía Infrarroja por diferencia de frecuencias ópticas.
- Simulación numérica.

LABOR INVESTIGADORA

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

El trabajo teórico se ha centrado en el estudio de la estructura y propiedades ópticas de cristales de hielo con diversos gases de interés atmosférico (HNO₃, HCl, y recientemente, CO₂) 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 y de transmisión de capas de diversos “hielos”. Se han publicado artículos relativos a la zona espectral de bajas frecuencias de hidratos de ácido nítrico, a la orientación observada en el crecimiento de cristales de dihidrato, y a las constantes ópticas del trihidrato (NAT), de posible aplicación para estudios in situ de identificación de esta especie.

Dentro del estudio de especies ternarias, hemos publicado también medidas de cristales de NAT sometidos a una exposición de HCl, en distintas condiciones de presión y temperatura. Las principales conclusiones indican que el HCl se adsorbe sobre el sustrato de NAT a bajas temperaturas (<100K) 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, en 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>.

En la citada página web, y más adelante en esta Memoria, se recogen las publicaciones del grupo en este año.

En el año 2006 se ha puesto a punto el nuevo espectrómetro de infrarrojo por transformada de Fourier, modelo Bruker Vertex 70, que ya ha comenzado a utilizarse para las medidas de este grupo de trabajo. El instrumento está disponible para ser compartido con otros grupos de investigación del Instituto.



Laboratorio de hielos atmosféricos con el nuevo espectrómetro Bruker Vertex 70 y la cámara de hielos.

- Cinética de plasmas fríos a baja presión.

Durante este año se han continuado los estudios de plasmas de H₂ a bajas presiones (0.8 y 20 Pa), encontrándose una concentración muy elevada de átomos de H (~10%) en nuestras descargas, así como un

fuerte aumento de la concentración de H_3^+ con la presión, en detrimento de la concentración de H_2^+ . Se ha perfeccionado el modelo cinético elaborado para explicar este comportamiento y se han comparado los resultados experimentales con las predicciones teóricas, encontrándose un acuerdo muy satisfactorio entre ambos, lo que ha permitido determinar la relevancia de mecanismos tales como las reacciones homogéneas ión-molécula y las reacciones en pared.

También se ha abordado el estudio de plasmas de H_2 con trazas de CH_4 y N_2 a baja presión, observándose indicios de una química muy compleja entre iones y especies neutras, en cuyo estudio se pretende profundizar próximamente.

A nivel instrumental se ha efectuado una notable mejora del sistema de adquisición y tratamiento de datos del monitor de plasmas, de acuerdo con la empresa fabricante, así como una puesta a punto completa del equipo, lo que ha repercutido en un aumento muy notable de sensibilidad y facilidad de manejo.

En colaboración con el Institut für Niedertemperatur-Plasmaphysik, de Greifswald (Alemania) se ha adquirido experiencia en el manejo de dos espectrómetros en el infrarrojo medio basados en láseres de diodos y en los nuevos láseres de cascada cuántica, y se han estudiado las ventajas e inconvenientes de uno y otro, así como su posible aplicación para el diagnóstico de los plasmas generados en nuestro laboratorio. Estas técnicas se han aplicado a la detección de óxidos de nitrógeno, así como a la del radical metilo.

En colaboración con la Universidad Ruhr de Bochum (Alemania), se ha llevado a cabo un estudio de los procesos que tienen lugar en descargas a baja presión, en mezclas de gases con hidrocarburos ligeros orientado a la formación de nanopartículas durante el crecimiento de capas delgadas.

También se ha llevado a cabo una revisión de los últimos avances de la deposición química en fase vapor a baja presión asistida por plasma en muy diferentes campos científicos y tecnológicos, tales como producción de materiales nanoestructurados, materiales para células de combustible, interacción plasma-pared en reactores de fusión, biomateriales, etc., y se ha puesto en evidencia la necesidad de mejora de los métodos de diagnóstico y modelado.

- Dinámica y cinética de reacciones químicas.

Se ha llevado a cabo una revisión sistemática de los progresos recientes en la dinámica reactiva de moléculas de H_2 con átomos excitados. En concreto se han considerado los átomos $O(^1D)$, $N(^2D)$, $C(^1D)$ y $S(^1D)$. En todas estas reacciones se tiene un pozo atractivo de potencial en el camino entre los reactivos y los productos, y la presencia de este pozo, con numerosos estados ligados, ha representado una gran dificultad para la realización de cálculos cuánticos exactos. Si embargo en la última década se han realizado grandes avances, tanto teóricos como experimentales, para este grupo de sistemas, prototípicos como reacciones de inserción. Hoy en día existen buenas superficies de potencial y cálculos cuánticos exactos y aproximados (en especial modelos cuánticos estadísticos) que proporcionan una buena descripción de los sistemas reactivos considerados. La mecánica clásica, cuyos resultados son más fáciles de interpretar en términos dinámicos, también se ha demostrado apropiada. Entre otros estudios, se ha aplicado el método de trayectorias cuasiclásicas para el cálculo de las distribuciones de tiempos de colisión en las reacciones mencionadas y se han observado interesantes diferencias entre los sistemas exotérmicos $O(^1D)+H_2$ y $N(^2D)+H_2$, con tiempos de colisión más cortos (< 400 fs), y las reacciones $C(^1D)+H_2$ y $S(^1D)+H_2$ que son casi termoneutras y cuyos tiempos de colisión superan en algunos casos los 2000 fs. Estas diferencias tienen implicaciones en las secciones diferenciales de reacción y distribuciones de estados observadas.

En el futuro próximo nos proponemos investigar el papel de la excitación interna de las moléculas de H_2 en la dinámica. Estos procesos son de gran interés en los plasmas fríos, mencionados en el apartado anterior.

Además de los mencionados trabajos sobre reacciones de inserción, dominadas por complejos de larga vida, también hemos comenzado recientemente un estudio sobre el posible papel de la estructura cuántica del estado de transición en el control de la reactividad en reacciones de abstracción directa.

- Fluidodinámica Molecular.

Se ha estudiado la agregación de para- H_2 en expansiones a partir de toberas criogénicas, concentrándose en la cinética de formación de dímeros. Para ello se han realizado barridos en temperatura y presión para encontrar las condiciones en las que sólo se forman dímeros. Posteriormente se han realizado barridos

axiales y transversales en condiciones representativas (0,6 bar/57 K, 1 bar/67 K, 2 bar/106 K), para obtener mapas de distribución de dímeros. En los experimentos realizados hasta la fecha se observa una mayor tasa de dimerización en las expansiones de 0,6 bar/57 K, aunque la fracción mayor de dímeros (1,4%) se consigue con 1 bar/67 K. Estos resultados, aún preliminares, se completarán en los próximos meses con nuevas series en distintas condiciones, y se extenderán a agregados mayores (trímeros, tetrameros, etc). Para extraer la fracción de dímero (~ 1 %) presente ha sido necesario poner a punto un programa de ajuste de perfiles de línea para descomponer los espectros registrados en sus componentes de monómero, dímero, etc.

En otra línea de trabajo se han realizado estudios de condensación de CO₂ en expansiones a partir de toberas en rendija. En esta línea se han medido varias series axiales y transversales de expansiones de 1 bar a 4 bar de CO₂ y N₂ mediante *scattering* elástico (Rayleigh) e inelástico (Raman). De los experimentos realizados se pueden obtener los tamaños medios de los agregados (entre 10 y 1000 moléculas) así como su tasa de crecimiento a lo largo de la expansión. Por otra parte, se ha estudiado el efecto de la onda de choque frontal (disco de Mach) -con sus fuertes condiciones de rethermalización y alta frecuencia colisional- sobre los agregados, encontrándose que, a lo largo del eje de la expansión, éstos desaparecen al atravesar la onda de choque para volver a aparecer aguas abajo del disco de Mach.

En el apartado instrumental se ha diseñado e instalado un sistema de toberas en rendija, que permite realizar expansiones 2D de gases, más suaves que las 3D con las toberas circulares empleadas hasta ahora, lo que permite medir con más precisión las cinéticas de formación de agregados y relajación colisional. La primera caracterización del campo de flujo de estas toberas en rendija constituyó el trabajo práctico de Héctor y Paula Corte León, estudiantes premiados en el certamen “Jóvenes Investigadores” del Ministerio de Educación y Ciencia.

También se ha optimizado el sistema de control para estabilización de la frecuencia del láser de Ar⁺ monomodo mediante anclado a una transición del yodo. Este anclado permitirá emplear con éxito una segunda célula de yodo para filtrar el *scattering* elástico, y poder registrar así espectros Raman de muy baja frecuencia.

Por otra parte, se ha instalado un sistema de control activo de la temperatura criogénica, para lo que ha sido necesario rediseñar el conjunto tobera y bloque-portatoberas, y se ha ajustado el lazo de control en distintas condiciones de trabajo. Como resultado se consigue una estabilidad en la temperatura de la tobera del orden de 0,01 K, lo que redundará en una mayor precisión de las medidas en las expansiones criogénicas de para-H₂. Finalmente ha sido necesario mejorar el diseño de la óptica de excitación y colección para resolver los problemas de estabilidad que surgen al trabajar con una fuente tan fría (40-60 K) a muy corta distancia de la óptica.

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

Los estudios de ensanchamiento de las líneas ro-vibracionales de la molécula de N₂ como consecuencia de las colisiones en mezclas N₂-H₂ se han proseguido y extendido al intervalo de altas temperaturas (440K y 580K). Estas temperaturas aún son bajas comparadas con las que se encuentran en los medios de combustión, típicamente de algunos miles de grados Kelvin. No obstante la realización de medidas experimentales de laboratorio a estas temperaturas resulta muy problemática, y por otra parte, la realización de cálculos precisos mecano-cuánticos a estas temperaturas resulta inviable debido al gran número de estados energéticos con población apreciable. La extensión de las medidas de laboratorio a algunos cientos de grados por encima de la temperatura ambiente, permite comprobar la fiabilidad de modelos semi-clásicos que, de ser efectivos, permitirán un cálculo fiable de ensanchamientos colisionales a las temperaturas reales de los medios de combustión y el escalado de las medidas de laboratorio a ese intervalo de temperaturas.

A este respecto se ha calculado una superficie de potencial ab initio, para el sistema N₂-H₂, que ha permitido completar los cálculos mecano-cuánticos en las aproximaciones *Coupled State* y *Close Coupling* para las medidas realizadas con anterioridad a 77K (y 298K en el caso de *Coupled State*, aún en progreso). Respecto a las temperaturas comprendidas entre 298K y 580K, los cálculos semiclásicos basados en un modelo de Robert-Bonamy, realizados previamente con un potencial átomo-átomo, se han repetido para la superficie de potencial obtenida, lo que ha permitido validar el modelo y su aplicabilidad para extrapolar los resultados obtenidos hasta las temperaturas típicas de combustión.

Con una orientación más específicamente atmosférica se ha concluido un estudio, comenzado tiempo atrás, acerca de los efectos colisionales en algunas transiciones ro-vibracionales de la molécula de H₂O. Aquí, basándonos en medidas realizadas por nosotros con la técnica de Espectroscopía Infrarroja por diferencia de frecuencias ópticas, hemos podido poner de manifiesto la dependencia de los parámetros colisionales respecto de la velocidad de las moléculas. Brevemente, estos efectos de velocidad indican que los modelos más simples de régimen intermedio, entre el régimen en que domina el ensanchamiento Doppler (perfiles de Gauss) y el que está dominado por las colisiones (perfiles de Lorentz), no está bien descrito por los modelos simples (perfiles de Voigt), que no tienen en cuenta el cambio de velocidad experimentado por la molécula en el proceso de colisión. Los perfiles de las líneas espectrales observadas, no se ajustan correctamente mediante perfiles de Voigt. Los ajustes mediante perfiles de Raut (colisiones duras) que consideran que la velocidad tras el choque no está correlacionada con la velocidad previa, dan cuenta de los perfiles pero conducen a valores del parámetro de estrechamiento que no son físicamente razonables. Teniendo en cuenta simultáneamente los efectos de velocidad y el estrechamiento de Dicke, ha sido posible mostrar que todos los perfiles observados, independientemente de la presión y de la transición, pueden ser explicados satisfactoriamente, demostrando la consistencia de la aproximación empleada para dar cuenta de los perfiles espectrales en los diferentes regímenes de presión que gobiernan los efectos de velocidad en las colisiones espectrales.

También, con una orientación atmosférica, se ha trabajado dentro del contrato ESTEC 1981306/NL/IA, de la Agencia Europea del Espacio para el desarrollo de una fuente láser en la región espectral de 2 μm, que pudiera ser embarcada en un satélite terrestre con el fin de monitorizar el CO₂ atmosférico. Se propuso investigar dos posibles desarrollos alternativos para lograr la fuente de las características requeridas: Un oscilador paramétrico óptico (OPO) y un Raman Shifter, contemplándose también la posibilidad de una solución mixta.

La responsabilidad del desarrollo del OPO correspondió a la “Office National d'Études et de Recherches Aéropatiales”, ONERA, mientras que en éste departamento se asumió la responsabilidad del desarrollo del Raman *shifter*. Se seleccionaron los medios activos adecuados y se hicieron las pertinentes medidas ópticas de caracterización sobre ellos para depurar una única propuesta concreta. Sobre dicha propuesta se realizaron estudios de diseño óptico y simulación numérica, llegando a la conclusión de que la máxima eficiencia esperable, ateniéndose a las constricciones necesarias para su utilización a bordo de un satélite, era del 11% de la potencia de bombeo, eficiencia realmente muy alta al tratarse de operación de la zona de infrarrojo medio y con un doble desplazamiento, pero inferior a la que presumiblemente se puede alcanzar mediante la alternativa del OPO.

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.
- Espectroscopía Molecular en el espacio.
- 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.
- Espectroscopía 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, simulaciones numéricas, física computacional.

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 permitiendo abordar los múltiples problemas que la Astrofísica moderna mantiene abiertos y los muchos desafíos que se deberán afrontar con los 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 , C_3H , C_6H , C_7H , C_8H , MgNC , HC_4N , C_4H 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 la 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 10^6 - 10^7 (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.

Los nuevos instrumentos abrirán ventanas del espectro electromagnético que son inaccesibles con los instrumentos actuales. Desde el punto de vista de la fisico-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, telescopio espacial 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.

Todas las líneas de trabajo descritas más abajo y enmarcadas en el contexto de ALMA, HERSCHEL y JWST requieren una preparación preliminar que será efectuada en los próximos años en los aspectos observacional, teórico y de laboratorio (espectroscopía, cinética química, etc.). Las principales líneas de investigación del DAMIR, y los principales resultados obtenidos en el 2006, son las siguientes.

- Medio interestelar.

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

- Química del gas frío en el Centro Galáctico. Estudio de moléculas orgánicas.
- Determinación de las condiciones físicas de regiones densas a través de las líneas rotacionales de SO y NNH^+ .
- Búsqueda de nuevas especies moleculares. Complejidad química. Finalización del *survey* espectral de Orión.
- Transferencia de radiación en nubes moleculares. Estudio del caso de H_2O en Orión y Sgr B2. Estudio del caso de OH en Orión.
- Estudio de las condiciones físico-químicas de las zonas de formación estelar. En particular del papel de los electrones en la excitación colisional de HCO^+ .
- Estudio de la formación estelar y de la interacción entre estrellas jóvenes de baja masa y el gas circundante.
- Estudio de la interacción de estrellas masivas con su entorno.

Las principales líneas de trabajo que se seguirán en el futuro en el DAMIR en el campo del Medio Interestelar 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 protoplanetariales: 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 10^{13} - 10^{14} 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 fisico-química de las moléculas más abundantes del medio interestelar (secciones de colisión CO, H₂O, HCN, CN con H₂ y He; frecuencias de moléculas floppy –clusters de carbón-, intensidades de las bandas de moléculas complejas como el metanol, etc.)

- Estudio de las zonas más internas de la formación de estrellas masivas: análisis de los procesos físicos asociados a la formación de estos objetos. Estudio de la complejidad química asociada a gas sometido a altas temperaturas por la radiación estelar o por los choques asociados a los vientos de estos objetos.

- Búsqueda de nuevas moléculas alrededor de estrellas jóvenes: Complejidad química y predicción químico-cuántica de frecuencias ro-vibracionales.

- Estudio de abundancias isotópicas como trazador de la evolución estelar (procesos nucleares en el interior de las estrellas). Tanto ALMA como HERSCHEL brindarán una oportunidad única para comprender la evolución de las razones isotópicas como una función de la distancia al centro de la galaxia. Dichos estudios permitirán establecer un conjunto de parámetros e indicadores para estudiar la evolución estelar en nuestra galaxia.

- Medio circunestelar.

Nuestro grupo ha desarrollado en los últimos años varias líneas de investigación en el campo del Medio Circunestelar. 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), el IRTF y el espectrómetro TEXES, el satélite ISO y recientemente el satélite ASTRO-F. Los principales resultados publicados en 2006 son:

Se ha finalizado el estudio de un barrido espectral entre 80 y 276 GHz de la nebulosa protoplanetaria CRL618 en el que se han identificado y modelizado 3100 líneas espectrales sobre 3180 detectadas, algo que no tiene precedentes en el análisis de este tipo de observaciones. El estudio ha permitido construir una representación detallada de las condiciones físicas, la morfología y las abundancias químicas en este objeto, lo cual tiene especial relevancia en el estudio de la transición desde la fase de gigante roja a la de nebulosa planetaria en estrellas de baja masa.

La química de moléculas con oxígeno en estrellas ricas en carbono ha sido estudiada en detalle. La producción de moléculas como H₂O y OH pone de manifiesto que no es necesario invocar la evaporación de cometas para justificar su presencia en estos objetos. Hemos demostrado que dichas moléculas se pueden producir por reacciones en fase gaseosa en las zonas externas de las envolturas circunestelares. Además, nuestros modelos han predicho la existencia de moléculas como CCCO. Dicha molécula fue encontrada posteriormente. Los resultados han sido publicados en *Astrophysical Journal Letters*.

En 2006 encontramos varias líneas rotacionales de SiS en el estado fundamental con emisión máser. Dichas líneas están bombeadas radiativamente por el recubrimiento en frecuencia de líneas ro-vibracionales de C₂H₂ y de SiS. Los resultados también han sido publicados en *Astrophysical Journal Letters*.

Las principales líneas de investigación en el futuro del DAMIR, con vistas a una preparación de la explotación científica de ALMA y de HERSCHEL en el campo de las estrellas evolucionadas 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 protoplanetaria. Fotoquímica de las moléculas carbonadas.

-Transferencia de radiación en 3-D: de la misma manera que para el medio interestelar, la resolución angular de ALMA requerirá el uso de códigos robustos de transferencia de radiación en 3-D.

-Diferenciación de la química en estrellas ricas en oxígeno (C/O<1) y ricas en carbono (C/O>1). Importancia de los procesos cinéticos para la presencia de especies carbonadas en estrellas ricas en oxígeno y viceversa.

-Estudio de la secuencia de formación de las grandes cadenas carbonadas (C₄H, C₅H, C₆H, C₇H, C₈H...) y de los procesos químicos que las hacen intervenir en la formación de grandes macromoléculas.

-Estudio de la emisión máser de HCN, SiO, H₂O, SiS y otras especies moleculares, desarrollo de códigos de transferencia de radiación capaces de trabajar con cientos de niveles de energía y miles de transiciones 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.)

-Estudio de la compleja morfología y dinámica de las nebulosas protoplanetarias y del origen y evolución de sus diferentes componentes: envoltura molecular, atómica y de polvo. Lanzamiento y colimación de vientos post-AGB y procesos físico-químicos resultantes de su interacción con la envoltura AGB.

- Espectroscopía cuantitativa de estrellas calientes en el infrarrojo y radio.

La actividad investigadora en este campo se ha centrado en los siguientes objetivos científicos:

Establecer los diagnósticos necesarios para obtener en el infrarrojo y radio información sobre la estrella y su viento: Estudios de la información que 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), basada en la teoría de los vientos causados por la radiación, como indicador de distancias.

- 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 las 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.

- Moléculas en galaxias.

En el 2006 el equipo de Astrofísica Molecular ha detectado una segunda línea máser (183.3 GHz) del vapor de agua en Arp220. Este descubrimiento permitirá estudiar zonas de menor densidad y temperatura que la otra línea del agua (22 GHz) utilizada en el pasado para estudiar las regiones centrales de galaxias activas. También se ha realizado el primer barrido espectral de una galaxia cercana en la ventana a 2mm del espectro electromagnético. La cantidad de líneas observadas de diferentes moléculas ha permitido realizar un estudio detallado de la complejidad química en estos objetos.

- 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 2006 los principales resultados han sido:

1. LIRGs y ULIRGs en el Universo Local.

Se continúa el estudio de las propiedades físicas y cinemáticas de LIRGs y ULIRGs mediante el uso de técnicas de espectroscopía óptica de campo integral e imagen infrarroja de alta resolución angular. Se han estudiado en detalle las poblaciones estelares del anillo de formación estelar circumnuclear en la galaxia

NGC 7469 (*Díaz Santos, Alonso Herrero, Colina*), así como los mecanismos de ionización y cinemática del sistema en interacción Arp 299 (*García Marín, Colina, Arribas, Alonso Herrero*).

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 2006, se ha participado (*Alonso Herrero, Colina, Díaz Santos*) en una propuesta de Spitzer para obtener mapeados espectrales en el infrarrojo cercano con IRS de una submuestra del LIRGs locales.

El estudio de 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) se ha desarrollado para una muestra completa de LIRGs cercanos mediante imagen infrarroja con el HST (*Alonso Herrero, Colina*). Al mismo tiempo, se ha iniciado un estudio (*Alonso Herrero, Díaz Santos, Colina*) de las galaxias en el infrarrojo medio para estudiar las regiones de formación estelar oscurecidas por polvo en las regiones nucleares de LIRGs y su aplicación como indicadores de formación estelar a distancias cosmológicas.

2. *LIRGs, ULIRGs y AGNs a distancias cosmológicas.*

Dentro del proyecto del instrumento MIRI del James Webb Space Telescope (JWST), se participa (*Alonso Herrero, 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. Se ha iniciado el desarrollo de simulaciones de LIRGs y ULIRGs a distancias cosmológicas tal y cómo serán detectadas por los instrumentos del JWST (*García Marín*). Como parte de la participación en JWST/MIRI, se ha desarrollado MTSSim, una herramienta informática para crear modelos radiométricos del simulador criogénico para el instrumento MIRI (*Labiano*). MTSSim será utilizado para el diseño y la realización de tests de MIRI.

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 2006 Almudena Alonso ha realizado varios trabajos de investigación sobre las propiedades de AGN a distancias cosmológicas. El primer trabajo estuvo dedicado a la búsqueda de AGN oscurecidos por métodos alternativos a las exploraciones profundas de rayos X. Para ello se seleccionaron galaxias con emisión de ley de potencia en el rango espectral infrarrojo cubierto por el instrumento IRAC del satélite Spitzer, y se determinaron las propiedades de este tipo de objetos. Aproximadamente un 50% de estas galaxias no están detectadas en rayos X, indicando que la emisión de AGN está oscurecida, y se encuentran a grandes distancias (desplazamientos al rojo $1 < z < 3$).

Además, Almudena Alonso ha participado en otros estudios dedicados al estudio multifrecuencia de AGN seleccionados en rayos X a desplazamientos al rojo intermedios ($z=1$) en colaboración con investigadores de la University of Arizona y de Harvard University.

3. *Radiogalaxias jóvenes.*

Se continúan investigaciones sobre radiogalaxias jóvenes compactas (fuentes GPS y CSS), su evolución e interacción con la galaxia anfitriona Álvaro Labiano mantiene colaboraciones activas con miembros del Rochester Institute of Technology en E.E.U.U. y Kapteyn Astronomical Institute (Países Bajos) entre otros. Fruto de estos trabajos, cabe destacar:

-Identificación de galaxias anfitrionas de radiogalaxias GPS mediante VLT de ESO y medida de corrimientos al rojo desconocidos. Combinando estas observaciones con las de otros grupos, se ha publicado un nuevo catálogo de referencia de fuentes GPS para uso de la comunidad internacional.

- Usando la cámara ACS a bordo del HST, se ha llevado a cabo el primer estudio de la emisión en el ultravioleta cercano de fuentes GPS y CSS. Se ha encontrado que la expansión de las radiogalaxias de tamaño mediano (~10-15 kpc) parece afectar fuertemente a la formación estelar de la galaxia anfitriona.

- 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 del simulador del interferómetro, de la librería de efectos atmosféricos para uso en la calibración de fase y amplitud.

Contrato con el European Southern Observatory para el desarrollo de software para ALMA

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

Contribución al Documentation workpackage dentro del Herschel Common Software System del Herschel.

Diseño y elaboración de herramientas del análisis de datos espectroscópicos dentro de Instrument Control Center (ICC) del HIFI.

Participación en la elaboración del programa científico del HIFI.

-Preparación del programa científico de Herschel (HIFI/PACS/SPIRE).

Participación en la elaboración del programa científico de Herschel.

Organización de reuniones científicas para la preparación científica de los programas de observación de Herschel.

-Mid InfraRed Instrument (MIRI) del 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.

Estudios de viabilidad de SPICA y H2EX.

- Gestión de proyectos internacionales.

- José Cernicharo Quintanilla:

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

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

Coordinador de los grupos Europa/EEUU para la preparación de la Ciencia de Herschel.

Mission Scientist de Herschel.

Miembro del Haut Comité Scientifique de l'Observatoire de Paris.

- Jesús Martín-Pintado Martín:

Representante español en el ALMA Board desde noviembre de 2004.

Responsable de la coordinación y gestión de la contribución del MEC a ALMA.

Miembro del Comité de Dirección del instrumento HIFI de Herschel.

Responsable de la contribución del CSIC al ICC del HIFI (Herschel).

- Luis Colina Robledo:

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

Investigador principal español de MIRI.

Coordinador de la participación científica española en MIRI.

- Francisco Najarro Parra:

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

2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Bioespectroscopía.
- Espectroscopía sobre superficies.

- 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 sistemas biológicos en alimentos derivados de pescado.
- Microespectroscopía Infrarroja y Raman como técnicas de biodiagnóstico.
- 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.
- Excitación de resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas: intensificación SERS.
- Propagación y dispersión de polaritones-plasmones superficiales ópticos sobre nanoestructuras metálicas, y de terahercios sobre microestructuras semiconductoras.
- 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.
- Cálculos analíticos y numéricos de *scattering* de ondas electromagnéticas por estructuras superficiales, basados en formulaciones exactas de ecuaciones integrales superficiales o aproximadas a partir de ecuaciones integrales reducidas de Rayleigh en el espacio de vectores de onda.
- Espectroscopía Óptica de Emisión.
- Fluorescencia inducida por láser.

LABOR INVESTIGADORA

- Interacciones proteínas-ácidos nucleicos de interés viral.

Se han estudiado por espectroscopía Raman, infrarroja y dicroísmo circular las interacciones entre la proteína core HCV-120 del virus HCV y la región 5' no codificante de su RNA en partículas nucleocápsidas obtenidas mediante heteroasociación de estos dos componentes. Aparte de las interacciones proteína-proteína mediante láminas- β que se han identificado previamente en estas partículas en ausencia de RNA, las nucleocápsidas que incorporan RNA viral adquieren estabilidad adicional a través de interacciones entre cadenas laterales de arginina y grupos fosfato y entre dichos residuos de arginina y bases de guanina. Estos resultados están apoyados por los obtenidos también considerando homoduplex de poli(rG)-poli(rC) y poli(rA)-poly(rU) (Proyecto BQU2003-01690).

- Relación entre estrés oxidativo y estructura proteica cerebral por Microespectroscopía Infrarroja.

Con el fin de estudiar los efectos del estrés oxidativo en la estructura y composición de componentes biomoleculares de cerebro, se han estudiado mediante microespectroscopía infrarroja y análisis multivariante muestras de corteza e hipocampo cerebrales de roedores tratados con anfetaminas, en colaboración con el Instituto S. R. Cajal (CSIC). Se ha demostrado por primera vez la formación de estructura proteica en lámina- β asociada al estrés oxidativo, puesto éste de manifiesto por cambios espectrales característicos de bandas lipídicas e hidroperóxidos. Los experimentos que hemos realizado de inmunohistoquímica e *immunoblotting* sugieren que estas proteínas ricas en estructura β tienen carácter amiloide, como ocurre en algunas enfermedades neurodegenerativas muy conocidas (Proyecto FMM-2004).

- Estructura de componentes biológicos de alimentos derivados de pescado.

Dentro de un proyecto financiado por la Unión Europea (Proyecto FP6-506359) se ha estudiado por espectroscopía Raman la estructura de geles de surimi y de fibra dietética de trigo (FDT) añadida a ellos con el fin de explicar las bases moleculares de las propiedades reológicas y funcionales de estos alimentos. El efecto de la adición de FDT a dichos geles consiste en una sustracción de agua de la matriz proteica de los geles y la subsiguiente formación de enlaces de hidrógeno agua-fibra más fuertes que los de agua-proteína. Del examen de los perfiles espectrales Raman de tensión OH se advierte asimismo que la FDT origina mayores tamaños de dominios de agua que le confieren a ésta mayor movilidad. Por tanto estos resultados son consistentes con la disminución observada de los coeficientes viscoelásticos de los geles que contienen FDT.

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

1 Preparación de nanopartículas metálicas.

Se ha continuado con 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 nanoestructurados. 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 SEIRA.

Se ha desarrollado también un método para inducción de nanopartículas de Ag por irradiación láser in situ sobre interfases sólido-líquido. Se ha llevado a cabo un estudio de las mejores condiciones de irradiación y concentración de metal para obtener nanopartículas con mejores rendimientos. Este método permite el análisis in situ de moléculas y materiales diversos sin necesidad de una extracción previa de los mismos.

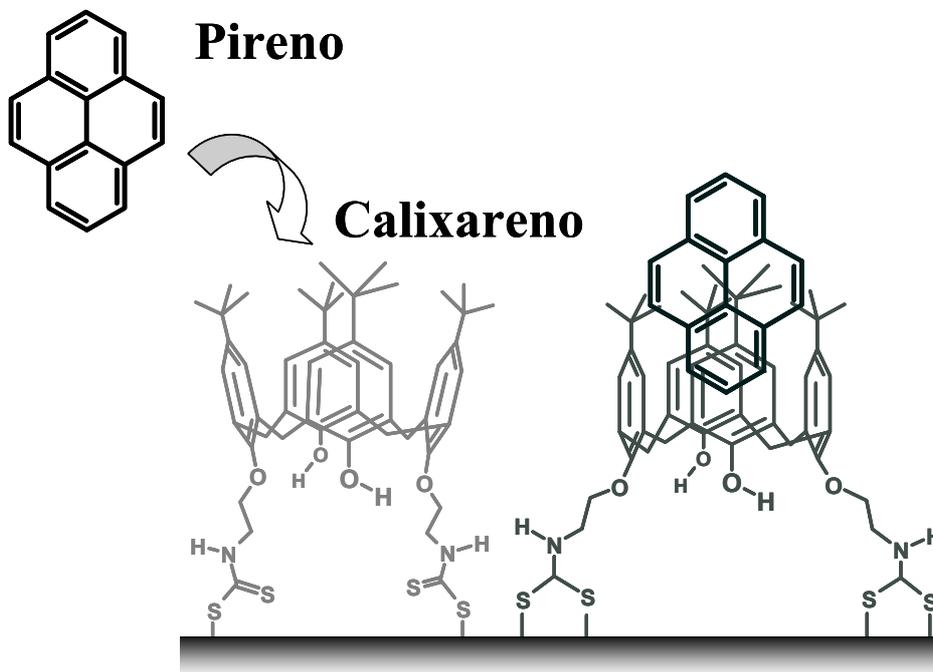
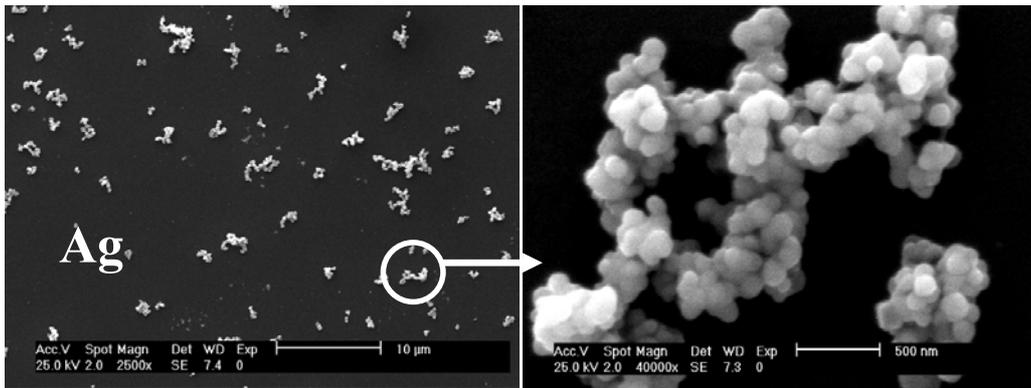
Otros métodos de preparación de nanopartículas ensayados en este período han sido la reducción de plata mediante radiólisis inducida por irradiación gamma y la producción de películas metálicas por deposición mediante láser pulsado (*Pulsed Laser Deposition*). Ambos métodos dieron lugar a nanopartículas “más limpias”, es decir, desprovistas de impurezas, y con mejores propiedades ópticas para dar lugar a una notable intensificación del campo eléctrico local.

2 Funcionalización de superficies metálicas.

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. En nuestro laboratorio hemos sintetizado calixarenos de cuatro unidades de benceno con funcionalización dicitricarbamato en la parte inferior para asegurar un mayor anclaje de estos compuestos al

metal, de esta manera se han obtenido mejores rendimientos en la funcionalización que condujeron a una mejor sensibilidad en la detección de los PAHs analizados.



Parte superior: Nanopartículas de plata inmovilizadas sobre un soporte de vidrio vistas mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) a diferentes ampliaciones. *Parte inferior:* Interacción del contaminante pireno con la molécula receptora calixareno sobre una superficie de plata.

Otro grupo de moléculas empleadas en la funcionalización de superficies metálicas ha sido el de los dicaciones biperidínicos. Estos iones son capaces de ensamblarse fuertemente sobre el metal a través de la formación de compuestos de transferencia de carga con iones haluro adsorbidos sobre la superficie. Estos sistemas moleculares actúan de dos formas: por una parte, como compuestos bifuncionales que permiten un acercamiento de partículas necesario para la creación de puntos de alta sensibilidad SERS (en inglés *hot spots*); por otra parte la naturaleza química de estos sistemas, que actúan como fuertes aceptores de electrones mientras que el sistema aromático que soportan, permiten una interacción con los PAHs mediante formación de complejos de transferencia de carga. Todas estas características los convierten en sistemas altamente activos en la detección de contaminantes de diversa naturaleza, como PAHs o pesticidas organoclorados. Entre los dicaciones biperidínicos empleados se encuentran: la lucigenina, y los pesticidas diquat y paraquat. Durante este año se ha llevado a cabo también una caracterización del pesticida diquat, menos estudiado que su homólogo paraquat, aunque no de menos interés medioambiental, al ser empleados conjuntamente como herbicidas.

La caracterización de superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos y dicaciones biperidínicos 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 receptor con el metal, así como la orientación que el mismo adopta sobre la superficie. En este último año hemos iniciado una nueva línea de investigación consistente en la aplicación de SEF (*Surface-Enhanced Fluorescence*) aparte de las ya aplicadas SERS y SEIRA, para llevar a cabo una mejor caracterización de sistemas fluorescentes, como pigmentos y fármacos fotoactivos, así como sustancias de interés medioambiental como las sustancias húmicas y sus complejos con pesticidas y PAHs. Nuestro objetivo es la aplicación conjunta de las técnicas SERS, SEIRA y SEF en la caracterización de sistemas moleculares de alta complejidad estructural.

La espectroscopía SERS y SEF combinadas están dando unos resultados muy satisfactorios en el caso del estudio de la interacción del fármaco antitumoral hipericina con proteínas transportadoras de suero sanguíneo como las LDL (Low-Density Lipoprotein) y DPPC (dipalmitoil fosfatidilcolina). Este estudio ha permitido obtener una valiosa información sobre el mecanismo biológico de la acción antitumoral fotoactiva del fármaco hipericina.

Dentro del ámbito de la funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas, una línea comenzada hace más de un año ha sido el diseño de sistemas mixtos metal-biomolécula para la detección de contaminantes. 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, albúminas de suero y ácidos húmicos, se han usado estas biomoléculas en la detección de estos compuestos. Así, se han obtenidos resultados muy satisfactorios para el caso de detección de pireno y criseno empleando sustancias húmicas extraídas de lignito, que presentan en su estructura un alto contenido de grupos aromáticos capaces de interactuar con ligandos aromáticos tipo PAHs. Otros anfitriones biológicos como albúmina de suero o ADN no han funcionado bien en la detección de contaminantes.

- 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, curcumina y flavonoides.

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. En este sentido ha sido interesante el estudio de la interacción de este pigmento con la albúmina de huevo, ya que uno de los posibles medios ligantes (*bindings*) de alizarina es la témpera de huevo. Asimismo, 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 en los que este pigmento se encuentre.

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 partículas obtenidas por reducción química, las preparadas por ablación láser y las preparadas por fotorreducción mediante radiólisis, encontrándose las condiciones óptimas para el estudio in situ de pigmentos sobre superficies de distinta naturaleza.

Otro grupo de pigmentos que se caracterizado mediante espectroscopía SERS es el de 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 debido a su alta fluorescencia. Por lo tanto, se está llevando a cabo un estudio de los modos vibracionales de un grupo seleccionado de flavonoides: cuercetina, catequina, apigenina, kaempferol, luteolina, etc. Este año hemos publicado un trabajo en el que se muestran los primeros espectros SERS de flavonoides. La conclusión más importante es que estas moléculas sufren una degradación sobre la superficie metálica, lo que constituye un problema para su estudio. Sin embargo, existen condiciones que permiten una caracterización de estos compuestos evitando su degradación. Por ejemplo, al funcionalizar las superficies metálicas mediante moléculas espaciadoras o mediante pasivación de la superficie metálica con haluros, se puede evitar la degradación.

Otra línea de investigación en curso relacionada con el Patrimonio la constituye la aplicación de la Espectroscopía Raman a la caracterización de materiales de construcción y la degradación de sulfatos por

formación de compuestos minerales como la taumasita. Este trabajo se está haciendo en colaboración con el instituto de Ciencias de la Construcción “Eduardo Torroja” del CSIC. El deterioro de morteros y hormigones por formación de taumasita es un tema de investigación de creciente actualidad e importancia, toda vez que el número de casos encontrados va en aumento. La Espectroscopía Raman es una técnica que permite el seguimiento de esta degradación mediante el análisis de las bandas características de estos materiales. En este sentido se ha iniciado una nueva línea de investigación consistente en la aplicación de la técnica SERS al estudio de la formación de taumasita en suspensión acuosa que está ya dando interesantes resultados.

- Excitación de resonancias plasmónicas en nanoestructuras metálicas: intensificación SERS.

Se ha continuado con la investigación teórica de la dispersión de luz y acoplamiento con plasmones superficiales localizados sobre superficies metálicas nanoestructuradas, similares a las empleadas como substratos en Espectroscopía SERS, con cálculos estadísticos de factores de intensificación del campo EM a la frecuencia de bombeo cerca de interfases que presentan estructura fractal auto-afín con fuerte presencia de rugosidad a escalas nanométricas. Recientemente, se ha desarrollado un modelo riguroso de la señal Raman emitida por películas moleculares (tipo Langmuir-Blodgett) situadas sobre substratos metálicos nanoestructurados. El modelo además no se restringe a la emisión Raman, sino que es aplicable a cualquier proceso de emisión espontánea colectiva sobre una interfase, tanto coherente como incoherente. Se puede incorporar fácilmente a formulaciones de *scattering* rigurosas para cálculos numéricos en el caso de nanoestructuras y nanopartículas metálicas complejas. De hecho, se han realizado ya cálculos preliminares de procesos de emisión superficial intensificados por dímeros de nanorectángulos metálicos, que desempeñan el papel de nano-antenas.

- Propagación y dispersión de polaritones-plasmones superficiales THz en microestructuras semiconductoras.

Se ha completado el estudio teórico, basado en sendas formulaciones (ecuaciones reducidas de Rayleigh y ecuaciones integrales de superficie), sobre la propagación y *scattering* de polaritones (tipo plasmón superficial), en el visible e IR sobre superficies metálicas con defectos submicrométricos, de enorme interés en Nano-Óptica, y en THz sobre superficies semiconductoras con defectos submilimétricos. En particular, se ha colaborado estrechamente con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de la Universidad de Aachen (Instituto de Semiconductores, RWTH, Alemania) para estudiar la propagación y transmisión de plasmones superficiales a lo largo de interfases de Si dopado y de InSb, estructuradas con líneas de agujeros rectangulares periódicamente distribuidos. En particular, se ha analizado la existencia de un gap en las superficies de silicio dopado, a partir de cálculos y medidas de la disminución de los coeficientes de transmisión y de la velocidad de grupo, que depende de la densidad de portadores del Si a través de la densidad de dopante. En el caso de muestras de InSb, también 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. En esta misma línea, se ha conseguido modificar localmente la respuesta electromagnética del InSb iluminando con un haz de luz visible de potencia variable, lo cual se ha explotado para demostrar que la conmutación óptica de plasmones superficiales también es posible, con la ventaja sobre la térmica de la mayor velocidad de conmutación.

- Estudio de la ablación inducida por radiación láser infrarroja.

Estamos llevando a cabo estudios de los procesos de ablación en diferentes sistemas: SiO y Polimetil metacrilato (PMMA) dopado con iodofenol y iodonaftaleno.

Hemos continuado con el estudio de la pluma de ablación del óxido de silicio irradiada a diferentes longitudes de onda. Hemos estudiado, mediante Fluorescencia Inducida por Láser (LIF), los mecanismos de ablación del SiO inducida a 266 nm. Hemos comprobado que mientras que la interacción del SiO con láseres en la región del infrarrojo está dominada por un mecanismo de tipo térmico, en la ablación a 266 nm participan diferentes mecanismos térmicos y fotoquímicos, probablemente indicando una situación de transición hacia el proceso de ablación a 248 nm en el que el proceso que domina es el fotoquímico. El estudio de la superficie ablacionada mediante Raman muestra que, cuando se ablaciona con láseres emitiendo en el infrarrojo medio, se forma en el área del blanco irradiada silicio microcristalino, lo que no ocurre en el proceso inducido por radiación con otras longitudes de onda.

En relación a la ablación IR del PMMA se ha utilizado, para la comprensión de los mecanismos de ablación y deposición en polímeros, una estrategia que consiste en el uso de dopantes constituidos por compuestos de fotoquímica bien conocida (iodonaftaleno y iodofenantreno). Hemos caracterizado, mediante LIF y microscopía óptica, la superficie ablacionada del PMMA dopado con las especies mencionadas, atendiendo al efecto del peso molecular de la matriz polimérica. Mediante LIF hemos detectado la formación de NaPH y PhenH a tiempos considerablemente mayores que los medidos en la irradiación a 248 nm. Este hecho es debido, por una parte, a la competencia que tiene lugar en la irradiación IR entre la excitación selectiva del modo resonante del PMMA hasta alcanzar el límite de disociación y la relajación vibracional, y también a los tiempos de difusión, mucho más largos en este caso.

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

Este tema se estudia en colaboración con el grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa).

Hemos llevado a cabo estudios para la obtención de depósitos de Se embebidos en matrices poliméricas derivadas del silicio. Hemos elegido el dimetilselenio como molécula precursora de los átomos de Se y 1,3-disilaciclobutano como precursor de la matriz polimérica. Se ha comprobado que la irradiación de mezclas gaseosas de ambos en proporciones variables da lugar a la descomposición homogénea y no interactiva de ambos compuestos y a la formación de depósitos de poliseleniocarbosilanos que no habían sido descritos previamente. La caracterización de estos depósitos se ha llevado a cabo por diferentes técnicas: Espectroscopía IR, micro-Raman confocal, SEM y XPS. Por otra parte, en esta reacción, se ha comprobado mediante LIF la formación en la fase gaseosa de las especies SiSe y C₂.

Otro sistema estudiado es el formado también por el dimetilselenio como molécula precursora de los átomos de Se y el trisilano como precursor de la matriz polimérica. Mediante LIF se ha comprobado la formación de las especies SiSe, SiH₂, Si₂ Se₂, y H₂ en la fase gaseosa de la reacción ayudando a establecer los diferentes caminos de reacción que tienen lugar. Las características del depósito resultante se han estudiado mediante FTIR, Raman, XPS y microscopias electrónicas de transmisión y barrido. Estos estudios demuestran la presencia en el sólido resultante de enlaces Si-Se y Si-Se-X(Si,C) y también la existencia de algún efecto de recubrimiento de las especies con enlaces Si-Se por parte del Si polimérico.

Otro sistema que se está estudiado en estos momentos es el formado por la mezcla de las especies tiorano (C₂H₄S) y trisilano (Si₃H₈). En este caso es de esperar que se produzcan partículas de S encapsuladas en la matriz polimérica de silicio. Mediante LIF se ha comprobado que en la fase gaseosa de la pirólisis inducida por la irradiación IR de la mezcla se produce la especie SiS. Esta especie ha sido identificada mediante la detección de dos de sus sistemas de bandas, el E¹Σ⁺--X¹Σ⁺ en la región 222.09-224.00 nm y el D¹Π--X¹Σ⁺ en la región 274.0-271.00 nm.

Por otro lado en colaboración con el Dr. J.J. Camacho del Departamento de Físico-Química de la Universidad Autónoma de Madrid se ha empezado a sondear, mediante técnicas espectroscópicas, el estudio del proceso de Breakdown en sistemas gaseosos tales como N₂, aire o benceno. Los resultados iniciales indican una posible utilización de esta técnica como forma de controlar la pureza de los gases.

2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Simulación de reacciones de polimerización y de propiedades físicas de polímeros.
- Propiedades físicas y nanoestructura de polímeros.
- Física de polímeros: movilidad y orden en sistemas macromoleculares.
- Aplicación de la luz sincrotrón al estudio de polímeros y materiales nanoestructurados.
- Intercaras.

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

- Estudio de los procesos de microdeformación, relación con la nanoestructura y optimización de propiedades mecánicas.

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

LABOR INVESTIGADORA

- Nanoestructura y propiedades micromecánicas de sistemas poliméricos de baja cristalinidad.

1.- Se ha llevado a cabo un estudio de los procesos de deformación en sistemas poliméricos de pequeña cristalinidad, cuya temperatura de transición vítrea es muy inferior a la temperatura ambiente, como es el caso de los copolímeros de etileno-1-octeno, realizado en colaboración con el Prof. Mathot de la Universidad Católica de Lovaina, Se ha propuesto un nuevo modelo de deformación al aplicar un esfuerzo de compresión y se han establecido, además, correlaciones entre las propiedades micromecánicas y las características nanoestructurales (dimensiones y energía libre de superficie de las laminillas) de este tipo de materiales.

2.- En colaboración con el Prof. Michler de la Universidad de Halle, se ha investigado la morfología de sistemas estireno/butadieno separados en microfases y su relación con las propiedades micromecánicas mediante microscopía electrónica y medidas de microindentación y deformación mecánica. Los resultados indican que la deformación mecánica de estos sistemas viene significativamente afectada por la presencia de cadenas homopoliméricas sin entrecruzamientos que dan lugar a una disminución de los valores de las magnitudes micromecánicas. En contraste con las mezclas de polímeros convencionales, en las que los valores de la microdureza no se desvían de la ley de aditividad, en estos sistemas los valores de esta propiedad mecánica muestran desviaciones notables con respecto de los valores teóricos. Este comportamiento anómalo se ha discutido a la luz de procesos de flujo local inducidos por una morfología de fases separadas a escala nanométrica.

- Procesos de microindentación en materiales poliméricos compuestos.

En colaboración con el Dr. Broza de la Universidad de Hamburg-Harburg se ha estudiado la influencia que la adición de pequeñas cantidades de nanotubos de carbono, de pared única o de pared múltiple, ejerce en

las propiedades mecánicas de una matriz polimérica como es el politereftalato de butileno (PBT). Las variaciones encontradas se han discutido de acuerdo a la forma en que se transfieren los esfuerzos entre la matriz y los nanotubos, al grado de dispersión de estos últimos y a su naturaleza.

Por otra parte, en colaboración con el Prof. Ward de la Universidad de Leeds, se han realizado medidas de microindentación en una serie de materiales compuestos de polietileno producidos mediante compactación física de fibras de PE de alto módulo elástico. Los resultados obtenidos permiten distinguir dos valores de microdureza, uno paralelo y otro perpendicular a la dirección del eje de fibra mediante los que es posible definir una anisotropía de microindentación. Los valores de microdureza están relacionados con la recuperación elástica instantánea de las fibras y los resultados obtenidos muestran que las medidas de microindentación producen una deformación del material comparable en magnitud a las dimensiones de las microfibras. La anisotropía de indentación aumenta al aumentar la orientación de las fibras; es decir, al aumentar el módulo elástico de las mismas.

- Desarrollo estructural en polímeros orientados mediante técnicas de difracción y microdureza.

En colaboración con el Prof. Asano, de la Universidad de Shizuoka, Japón, se ha realizado una investigación, combinando técnicas de rayos X y de microdureza, sobre el desarrollo cristalino que tiene lugar a temperaturas superiores a 100°C en poliésteres, como el PET, uniaxialmente orientados. Asimismo, se ha comparado con la estructura que se desarrolla en sistemas orientados a temperatura ambiente y con la de aquellos estirados a temperaturas cercanas a la transición vítrea (90°C). El resultado obtenido de mayor relevancia es la demostración de que existe una relación de complementariedad entre la inclinación de la superficie de las laminillas y aquella del eje *c* cristalográfico.

Por otro lado, se ha caracterizado la transición polimórfica β - α en polipropileno isotáctico (iPP) mediante medida de la microdureza (H). Para ello se ha investigado mediante indentación la superficie de la zona de deformación bajo la acción de una tensión uniaxial en muestras de β -iPP inyectado en molde. Los resultados obtenidos evidencian una disminución repentina de los valores de microdureza en lugar del aumento esperado de H debido a la transición polimórfica β - α . En una zona suficientemente alejada del “cuello” de deformación se observa, sin embargo, el aumento de H. En dicho cuello de deformación se pone en evidencia la destrucción de la estructura esferulítica inicial y una disminución de la cristalinidad, lo que provoca la disminución de H observada. Sin embargo, en zonas alejadas del cuello la nueva estructura de fibra que se crea induce una orientación molecular que da lugar a un ligero aumento de H. El análisis mediante DSC y difracción de rayos X de muestras isotrópicas y deformadas, antes y después de tratamientos térmicos, apoya la hipótesis de la creación de micro-vacíos con la consiguiente disminución de los valores de microdureza.

- Modificación de la estructura y propiedades de polipropileno isotáctico mediante entrecruzamiento químico.

En colaboración con el Dr. S. Bouhelal, de la Universidad de Sétif (Argelia), se han caracterizado muestras de polipropileno isotáctico entrecruzado de forma reversible por vía química. La caracterización de los materiales obtenidos se ha realizado mediante calorimetría diferencial, difracción de rayos-X a ángulos grandes, microdureza y medida de las propiedades mecánicas macroscópicas. Los resultados indican que la estructura cristalina del polímero apenas se ve afectada por el proceso de entrecruzamiento. Sin embargo, el proceso provoca una transición de frágil a dúctil en las muestras entrecruzadas, lo que provoca un notable aumento de la resistencia al impacto del material. También se han preparado mezclas de polipropileno isotáctico y polietileno de baja densidad en diferentes proporciones, entrecruzadas mediante el procedimiento anterior. Actualmente, se está realizando el estudio de la microestructura de estas mezclas y de la correlación de la misma con las propiedades micro- y macro-mecánicas.

- Primeros estadios de la cristalización de polipropileno en estado fundido sometido a un campo de deformación de tipo cizalla.

En colaboración con el grupo de la Profa. J. Kornfield, del Instituto Tecnológico de California (Caltech) se han efectuado estudios simultáneos de difracción de rayos X a ángulos grandes y pequeños y de difracción de luz en la línea BM26b del ESRF en Grenoble. El origen de los enormes efectos, que el flujo del material en estado fundido produce sobre el proceso de cristalización inmediatamente posterior, parece residir en la aparición de ciertos estados orientados precursores. La creación de estos estados depende tanto de las propiedades del material como del esfuerzo aplicado. La sensibilidad del sistema reo-óptico ha permitido la

detección de esos precursores pese a estar enormemente dispersos en el momento de ser inducidos por el flujo del material fundido y cuando todavía son invisibles para las técnicas de rayos X. Posteriormente, con el inicio de la cristalización éstas últimas técnicas han permitido cuantificar de forma detallada las características y la cinética de crecimiento de los microcristales que inician su nucleación a partir de los precursores.

- Estudio de la nanoestructura de materiales multilaminares mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS).

Se ha investigado por primera vez la nanoestructura laminar de sistemas compuestos por miles de láminas apiladas de pares de homopolímeros inmiscibles completamente amorfos (PMMA/PS, PMMA/PC y PMMA/SAN). Se ha encontrado una excelente correlación entre los valores nominales de las distancias interlaminares (largos espaciados) y los calculados a partir de diagramas experimentales de USAXS. Sin embargo, un análisis más detallado revela que los espaciados más pequeños tienen valores ligeramente mayores que los esperados. Este resultado, junto con observaciones efectuadas mediante TEM, parece indicar que existe una cierta tendencia a que las láminas más finas se coaliguen en ocasiones, dando lugar a espaciados promedio mayores.

- Procesos de recristalización en PET previamente cristalizado desde el estado vítreo.

Se realizaron medidas de difracción de rayos-X a ángulos grandes y pequeños simultáneamente, empleando una fuente de radiación sincrotrón, en función de la temperatura, en PET previamente cristalizado desde el estado vítreo. Estos estudios tienen como objetivo discernir los procesos que tienen lugar durante el calentamiento del sistema, desde temperatura ambiente hasta la temperatura de fusión. El análisis preliminar de los resultados sugiere que la fase amorfa rígida desempeña un papel fundamental en el reajuste estructural del sistema durante el calentamiento. Estos estudios se han realizado en colaboración con el Dr. Marco Pieruccini, del CNR (Mesina).

- Modelización de la reactividad de catalizadores bisindenil zirconocenos. Efecto de la sustitución alquímica en el ligando aromático sobre el peso molecular del polímero obtenido.

La motivación del presente trabajo surge a partir de la observación experimental realizada en los laboratorios de Repsol referente al descenso en el peso molecular del polímero obtenido con sustituyentes propilo o superiores en posición 3 del ligando aromático. Se han calculado perfiles de energía potencial para los procesos de inserción, propagación de cadena y las reacciones de terminación más probables como β -transferencia al monómero y β -eliminación. Se han contemplado los dos casos frontera en el comportamiento diferencial, los zirconocenos con sustituyentes etilo versus propilo. La gran semejanza de los perfiles obtenidos con ambos catalizadores motivó la inclusión de nuevos elementos en los modelos tales como presencia del comonómero 1-hexeno y cocatalizador. Los resultados obtenidos en dichas simulaciones sobre estos nuevos sistemas más complejos revelan nuevamente el gran parecido en el comportamiento catalítico de ambos complejos y dirigen la tarea investigadora a la incorporación de nuevos elementos no tenidos en cuenta hasta la fecha tales como el soporte silíceo o algún otro modelo del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) más apropiado, proceso en el que se viene trabajando actualmente.

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

La aplicación exitosa de la metodología 3D-QSAR (*3-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship*) en el ámbito de los catalizadores de centro activo único llevada a cabo por nuestro grupo en años anteriores ha motivado el análisis sucesivo de nuevos conjuntos de catalizadores ensayados en las mismas condiciones experimentales.

En el marco del proyecto financiado por la Comunidad Autónoma de Madrid, en el que nuestro grupo participa, se colaboró con el grupo del profesor Mariano Fajardo de la Universidad Rey Juan Carlos en el análisis de correlaciones entre datos experimentales de actividad catalítica obtenidos por la URJC y descriptores de la estructura molecular sobre complejos zirconocenos. En este caso la variabilidad estructural explorada en estos catalizadores residía en la naturaleza de los sustituyentes del átomo puente silano que une los dos ligandos ciclopentadienilos del metaloceno. Los modelos obtenidos destacan la importancia de las interacciones estéricas intermoleculares, posiblemente entre catalizador y cocatalizador,

como responsables mayoritarios de la variabilidad encontrada en los datos experimentales correspondientes a actividad catalítica y peso molecular del polímero obtenido.

Por otro lado, se ha llevado a cabo un estudio de correlación estructura-actividad sobre un conjunto de catalizadores postmetalocénicos bisimino piridina de hierro para polimerización de etileno, ensayados en los laboratorios de Repsol YPF. Dada la polémica existente hasta la fecha sobre la naturaleza de la especie activa de dichos catalizadores, se decidió iniciar el estudio considerando las estructuras de los precursores catalíticos dihalogenados. Los modelos más significativos correlacionan satisfactoriamente efectos estéricos y electrostáticos de la estructura molecular con los datos de peso molecular del polímero obtenido experimentalmente.

- Síntesis de nuevas poliolefinas funcionalizadas con arquitectura controlada.

Se ha explorado el uso de catalizadores de centro activo único para la síntesis de nuevas poliolefinas funcionalizadas. Se han obtenido diversas familias de copolímeros de etileno y alcoholes superiores, mediante el uso de distintos catalizadores de centro activo único, con objeto de establecer el efecto de la estructura de los catalizadores en los materiales poliméricos obtenidos, tanto desde el punto de vista de actividad de las reacciones de polimerización (actividad del catalizador) como desde el punto de vista estructural (pesos moleculares y polidispersidad, incorporación de comonómero y composición química de los copolímeros). 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 alcohol aumenta. Los catalizadores con puentes de carbono y ligandos rígidos dan lugar a copolímeros con los mayores contenidos en comonómero. Se ha comprobado que algunos sistemas catalíticos no resultan viables para la incorporación de alcohol.

- Estudio viscoelástico de modelos moleculares y mezclas: procesabilidad.

Se ha realizado un estudio básico de las propiedades viscoelásticas del fundido en el régimen lineal en los nuevos modelos moleculares de copolímeros de etileno/estireno. Entre los aspectos más novedades hay que destacar la validez de estos materiales como polímeros modelo a la hora de establecer la dependencia de las propiedades viscoelásticas y las características estructurales y moleculares a nivel microscópico. Uno de los resultados más interesantes en este aspecto ha sido el establecimiento, a través de las medidas viscoelásticas, de una clara diferencia en cuanto a la arquitectura molecular entre los polímeros obtenidos mediante nueva catálisis y aquellos sintetizados mediante los catalizadores comerciales. Mientras que los primeros presentan la huella viscoelástica característica de polímeros lineales de ultra-alto peso molecular (con interesantes aplicaciones tecnológicas y biomédicas), los segundos presentan las señales características de la presencia de ramificaciones de cadena larga, en principio no deseada, desde el punto de vista del estudio de materiales como modelos moleculares.

Por otro lado, se ha continuado con el estudio de las mezclas de modelos moleculares con diferentes materiales poliméricos (copolímeros EVA y UHMWPE) a la luz de distintos modelos físicos constitutivos aplicados a diferentes escalas. Por un lado, se han estudiado las propiedades viscoelásticas a la luz de modelos que asumen interacción segmental (miscibilidad) entre las especies moleculares, o ascendiendo un peldaño en la escala, de modelos que contemplan la presencia de una interfase, o zona de interacción entre las diferentes especies moleculares y su efecto sobre las propiedades del fundido (inmiscibilidad). Las propiedades en el fundido se han manifestado extremadamente sensibles tanto a la composición de la mezcla como a la morfología del sistema. Se han establecido criterios que definen las características morfológicas y que afectan profundamente a la procesabilidad de las mezclas. Es bien conocido que los sistemas que actúan como modelos moleculares son difícilmente procesables, debido a la aparición de inestabilidades durante el flujo íntimamente ligadas al estado de enmarañamiento. La adición de otras especies moleculares (EVA y UHMWPE) no sólo altera este estado de enmarañamiento, sino también la propia morfología del fundido, dando lugar a un comportamiento viscoelástico, y por tanto un comportamiento durante el flujo macroscópico, totalmente distinto y que conlleva la desaparición de los fenómenos de distorsión.

- Simulación numérica del procesado de poliolefinas.

Se ha dado un paso más para entender el comportamiento de los materiales poliméricos durante el procesado, a través de la aplicación de herramientas computacionales. Se han aplicado ecuaciones fenomenológicas constitutivas que describen la relación entre el esfuerzo y la deformación al problema del flujo de polímeros a través de boquillas circulares, mediante la definición de la geometría a través de

elementos finitos. Se ha comprobado que los detalles que definen la arquitectura molecular (colas de alto peso molecular) y que afectan a las propiedades reológicas básicas (viscosidad, tiempo de relajación), modulan el flujo de los materiales sometidos a las mismas condiciones de proceso, y afectan enormemente a los fenómenos post-extrusión, como el hinchamiento tras la salida de la boquilla. Estas herramientas de cálculo asistido por ordenador han demostrado además ser muy útiles para el entendimiento de fenómenos en flujos más complejos, tales como aquéllos que se producen en las extrusoras de doble husillo.

- Viscoelasticidad y procesos de cristalización.

Se han realizado estudios combinados sobre el desarrollo morfológico y el comportamiento viscoelástico durante los primeros estadios de la cristalización en poliolefinas, mediante microscopía óptica y reometría. Los resultados obtenidos sugieren que la dinámica del sistema que cristaliza se comporta como un sistema de partículas esféricas sólidas (esferulitas-fase cristalina) en una suspensión de un líquido viscoelástico (fase amorfa). Este resultado es muy interesante, ya que supone un paso más en la descripción de los sistemas poliméricos durante los procesos de cristalización y en la relación que existe entre la microestructura y las propiedades, y que además es necesario para el estudio de los procesos de cristalización inducidos por el flujo, que son aquéllos que sufren los materiales semicristalinos en su ciclo de uso. 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 e Ingeniería Química de la Universidad Tecnológica de Eindhoven, concerniente al efecto de la arquitectura molecular en la microestructura y en las propiedades viscoelásticas durante los procesos de cristalización inducida por el flujo en polipropilenos lineales y ramificados. Para ello se ha contado con la combinación de técnicas reológicas en combinación con medidas de WAXS y SAXS realizadas en el ESRF de Grenoble. Los resultados indican la existencia de distintos regímenes de cristalización controlados por las especies de más alto peso molecular. También se ha puesto de manifiesto la posibilidad de aplicar modelos microscópicos basados en la reptación para identificar las especies activas en los procesos de deformación, y que finalmente son las responsables de la particular microestructura que se desarrolla durante la cristalización.

- Estudio de la relación entre la arquitectura molecular, la microestructura y las propiedades mecánicas.

Ya se apuntaron en la memoria correspondiente al año 2005 los excelentes 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). Este sistema, además de generar actividades 10 veces superiores a otros catalizadores disponibles comercialmente (catalizadores de geometría constreñida o CGC), da lugar a materiales con un elevadísimo peso molecular, de gran interés en aplicaciones donde se requiere elevada resistencia mecánica y a la fricción. 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. Se ha realizado un estudio exhaustivo de las características estructurales y las propiedades mecánicas en función de la temperatura y del contenido de comonomero en estos materiales de etileno/estireno. La cristalinidad se ha evaluado mediante rayos X, densidad, espectroscopía Raman y entalpía de fusión. Los resultados de tracción y de los experimentos dinamo-mecánicos han permitido arrojar nueva luz sobre las transiciones mecánicas de la familia de los polietilenos. De especial relevancia son los referentes a la transición vítrea, que se ve muy alterada por la presencia de las ramificaciones, así como por la naturaleza química de dichas ramificaciones. Se observan claras diferencias entre los copolímeros etileno/estireno y los copolímeros alifáticos estudiados en el grupo con anterioridad. Se ha comprobado que la presencia del comonomero afecta no sólo a los valores del módulo elástico sino también a la movilidad molecular de la fase amorfa. Sin embargo, mientras que el módulo elástico (por debajo del límite de la deformación no recuperable) solo se ve afectado por la cristalinidad, el esfuerzo en la zona de fluencia se ve enormemente afectado por la estructura química (movilidad de la fase amorfa). Los copolímeros de etileno/estireno exhiben un marcado comportamiento de endurecimiento por deformación ("strain-hardening"), como consecuencia de la mayor fricción local (a nivel molecular) aportada por la presencia de las rígidas unidades de estireno. Este comportamiento los diferencia claramente de los materiales con base alifática.

También se ha llevado a cabo el estudio preliminar de la estructura y las propiedades térmicas de los copolímeros funcionalizados con alcoholes superiores, mediante CRYSTAF y calorimetría diferencial de barrido. El aumento en el contenido en comonomero reduce la cristalinidad y la temperatura de fusión. El espesor de las laminillas cristalinas se ve significativamente afectado por la presencia de unidades

hidroxílicas en la cadena polimérica. Los materiales exhiben un amplio espectro de propiedades, en función de la cantidad de comonomero.

- Simulación de propiedades de poliolefinas.

Se ha llevado a cabo una primera aproximación a la simulación de ciertas propiedades de poliolefinas modelos obtenidas en laboratorio. El estudio se ha centrado en un análisis exhaustivo de la banda observada en Espectroscopía Raman correspondiente a la estructura ortorrómbica de la red cristalina, en función de las características del cristal obtenidas mediante WAXS y DSC. Para estos materiales se observa la expansión característica de la celdilla unidad a medida que aumenta la cantidad de comonomero (en este caso 1-hexeno), y un desplazamiento sistemático de la banda cristalina en Raman. El desplazamiento experimental se interpreta en términos de las variaciones encontradas en la estructura ortorrómbica. Los cálculos realizados mediante DFT utilizando los parámetros de la celda unidad experimentales ponen de manifiesto una variación lineal de la banda cristalina con los parámetros estructurales similar a la obtenida experimentalmente.

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

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

La aproximación a estos problemas se ha llevado a cabo desde dos vertientes, dependiendo de los intereses de las empresas involucradas. Por un lado desde el desarrollo de nuevas mezclas físicas de polímeros entre materiales de diferente arquitectura molecular, y cuyo objetivo es mejorar ciertas propiedades y características de los polímeros de partida; y por otro desde el estudio de materiales obtenidos mediante novedosos procesos de síntesis, capaces de generar arquitecturas moleculares muy definidas que den lugar a las propiedades fisico-químicas más adecuadas para aplicaciones concretas.

Dentro de las actividades de colaboración hay que destacar varios aspectos. En primer lugar, la estancia de la Dra. María Teresa Expósito en el Centro Tecnológico de Repsol-YPF durante tres meses (septiembre-noviembre 2006), periodo durante el cual se ha llevado a cabo la síntesis de nuevos polímeros de base olefinica funcionalizados con alcoholes superiores, mediante el uso de catalizadores de centro activo único. En segundo lugar, y durante el desarrollo de las distintas colaboraciones, se han celebrado reuniones y seminarios periódicos (tri o cuatrimestrales), tanto en el Instituto de Estructura de la Materia como en los Centros Tecnológicos de las empresas, en los que se han presentado los resultados obtenidos más relevantes.

- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.

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

Hemos continuado la línea de investigación experimental encaminada a obtener tanto información estructural, mediante difracción de rayos X, como dinámica, mediante espectroscopía dieléctrica, de forma simultánea durante procesos de ordenamiento en polímeros. Para la realización de estos experimentos hemos hecho uso de luz sincrotrón en el “Deutsches Elektronen Synchrotron” (DESY) de Hamburgo, Alemania. En particular hemos investigado el ordenamiento cristalino en muestras de poliisofalato de butileno (PBI) en un amplio espectro de frecuencias. Los resultados obtenidos permiten proponer un modelo de cristalización en polímeros que diferencia claramente la cristalización primaria de la secundaria.

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

En colaboración con científicos del Max-Planck Institut de Maguncia, Alemania, y mediante difracción de rayos X con técnicas de microfoco y microscopía de fuerzas atómicas (AFM) se ha caracterizado el

desarrollo de estructuras organizadas en diferentes polímeros controladas por plantillas carbonáceas. La implicación de este fenómeno en la obtención de nanoestructuras poliméricas definidas está siendo explotada en otros sistemas basados en nanotubos de carbono de diferente naturaleza.

3. Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

Continuando la actividad de nuestro grupo en sistemas con nanotubos de carbono se han investigado mediante micro-difracción de rayos X con radiación sincrotrón en *nanocomposites* poliméricos inyectados en molde basados en nanotubos de carbono de pared simple (*Single Wall Carbon Nanotubes*, SWCNT) mezclados con politereftalato de butileno (PBT) y con polietilen-tereftalato (PET). Se ha puesto de manifiesto la heterogeneidad de la distribución de la red de nanotubos y su relación con los flujos de elongación y cizalla. Medidas realizadas en el estado fundido han puesto de manifiesto la estructura fractal de la red tridimensional de nanotubos en estos *nanocomposites*. En colaboración con la Dra. Concepción Domingo se ha investigado en paralelo la agregación de nanotubos mediante espectroscopía Raman.

4. Dinámica molecular en sistemas amorfos.

En colaboración con el Dr. Sebastián Muñoz-Guerra de la Universidad Politécnica de Barcelona se ha continuado con la investigación sobre la dinámica molecular en materiales amorfos mediante la técnica de Espectroscopía Dieléctrica de banda ancha. En este aspecto se han estudiado, entre otras, las relajaciones por debajo y por encima de la transición vítrea de distintos copolímeros de PBT de interés tecnológico. Estas investigaciones unidas a medidas similares realizadas en una gran variedad de poliésteres aromáticos han permitido establecer una posible relación entre la dinámica local, que aparece por debajo de la temperatura de transición vítrea, y la dinámica segmental. De esta interrelación, hemos verificado que el modelo de acoplamiento (*coupling model*) permite describir la dinámica molecular en poliésteres aromáticos.

5. Materiales poliméricos con propiedades avanzadas.

Dentro de este capítulo nuestro grupo, en colaboración con los grupos de síntesis del Instituto Max-Planck de Maguncia (Prof. K. Müllen) y de la Universidad Autónoma de Méjico (Prof. M. Zolotukhin), ha investigado nuevos sistemas poliméricos encaminados a mejorar las propiedades de conducción electrónica mediante el auto-ensamblaje controlado de las unidades moleculares constitutivas del polímero. En este sentido se han investigado diferentes sistemas poliméricos basados en sistemas con estructuras discóticas que incluyen éter-coronas y hexa-peri-hexabenzocoronenos. Adicionalmente, se han investigado las modificaciones de las propiedades de conducción eléctrica mediante sulfonación controlada de polímeros.

6. Consecución de una estación de trabajo para medidas simultáneas de difracción de rayos X a ángulos altos y bajos en la línea española BM16 del "European Synchrotron Radiation Facility" (ESRF) de Grenoble, Francia.

Durante el año 2006 hemos finalizado con éxito el diseño, construcción, puesta a punto y verificación experimental de un sistema para la realización de experimentos simultáneos de difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS) y pequeños (SAXS) en la línea española BM16 del ESRF. El sistema permite la realización de experimentos en función de la temperatura y la implementación de distintos entornos de muestra. Durante 2006, este sistema ha sido puesto a disposición de la comunidad de usuarios española y la respuesta ha sido satisfactoria, sobrepasando todas las expectativas. En particular nuestro grupo de investigación ha realizado medidas de cristalización bajo cizalla y temperatura, poniendo de manifiesto que el sistema experimental trabaja en plenas condiciones de competitividad con otras líneas de gran tradición.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Efectos de la correlación electrónica en nanotubos de carbono.

Código o Referencia: FIS2005-05478-C02-02.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José González Carmona.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

Objetivos: Estudio de las inestabilidades electrónicas y superconductividad en nanotubos de carbono de pequeño diámetro y nanotubos multicapa.

Renormalización de la superficie de Fermi.

Código o Referencia: 2005BR0044.

Entidad Financiadora: Proyecto de Colaboración CSIC-CNPq.

Investigador Principal: José González Carmona.

Periodo: enero 2006-diciembre 2007.

Objetivos: Estudio de la modificación de la curvatura de la superficie de Fermi y de las propiedades de cuasipartículas por efecto de la correlación electrónica.

Gravedad no perturbativa y agujeros negros: simetrías, métodos numéricos y analogías en materia condensada

Código o Referencia: FIS2005-05736-C03-02.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Guillermo A. Mena Marugán.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

Objetivos: Desarrollo de técnicas de cuantización no perturbativa para sistemas gravitatorios y aplicación de formalismos geométricos a relatividad numérica.

Horizontes en relatividad general: dinámica, métodos numéricos y analogías en materia condensada.

Código o Referencia: FIS2004-01912.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Guillermo A. Mena Marugán.

Periodo: mayo 2005-abril 2006

Objetivos: Estudio de horizontes de agujeros negros y cosmológicos en gravedad cuántica, relatividad numérica y mediante analogías en materia condensada.

3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Estructura y dinámica microscópica de sistemas nanoestructurados.

Código o Referencia: MAT-2002-04540-C05-03.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2003-2006.

Finalización del espectrómetro secundario IN8C (Instituto Laue Langevin).

Código o Referencia: MAT2004-20216-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2005-2006.

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS.

Código o Referencia: MAT2004-21384-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2005-2006.

Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS.

Código o Referencia: MAT2005-24500-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.
Periodo: 2006-2007.

Métodos analíticos y numéricos exactos en física nuclear y otros sistemas fuertemente correlacionados.

Código o Referencia: BFM2003-05316-C02-02.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Jorge Dukelsky Bercovich.
Periodo: diciembre 2003-noviembre 2006.

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

Código o Referencia: IN2P3 06-07.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Jorge Dukelsky Bercovich.
Periodo: julio 2006-junio 2007.

Métodos analíticos y numéricos exactos en física nuclear y otros sistemas fuertemente correlacionados. Modelos exactamente solubles y cálculos de gran escala en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

Código o Referencia: FIS2006-12783-C03-01.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Jorge Dukelsky Bercovich.
Periodo: noviembre 2006-noviembre 2009.

Contribución al experimento ISOLDE del CERN.

Código o Referencia: FPA2004-20178-E.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: M^a José García Borge.
Periodo: septiembre 2005- septiembre 2006.

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

Código o Referencia: FPA2005-02379.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: M^a José García Borge.
Periodo: diciembre 2005-diciembre 2007.

Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.

Código o Referencia: IN2P3 06-04.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia- IN2P3.
Investigador Principal: M^a José García Borge.
Periodo: enero 2006-diciembre 2006.

Simulaciones para el desarrollo de un espectrómetro gamma para el experimento R3B de FAIR.

Código o Referencia: AECI A/4294/05.
Entidad Financiadora: Ministerio de Asuntos Exteriores.
Investigador Principal: M^a José García Borge/Tarek El Bardouni.
Periodo: enero 2006-diciembre 2007.

Simulaciones para el desarrollo de un espectrómetro gamma para el experimento R3B de FAIR.

Código o Referencia: AECI A/6248/06.
Entidad Financiadora: Ministerio de Asuntos Exteriores.
Investigador Principal: M^a José García Borge/Tarek El Bardouni.
Periodo: diciembre 2006-diciembre 2007.

Estudio de reacciones y caracterización de detectores de radiación para FAIR mediante el uso de la línea de Física Nuclear del CMAM.

Código o Referencia: PIE 2004 5 0E 222.
Entidad Financiadora: CSIC.
Investigador Principal: M^a José García Borge.
Periodo: mayo 2006-abril 2007.

Contribución al experimento ISOLDE del CERN.

Código o Referencia: FPA2005-25345-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: M^a José García Borge.

Periodo: julio 2006-julio 2007.

Estructura y reacciones con núcleos exóticos.

Código o Referencia: FIS2005-00640.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Pedro Sarriguren Suquibide.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

Desarrollo de detectores para experimentos de astrofísica.

Código o Referencia: 2005GB0081.

Entidad Financiadora: CSIC-The Royal Society UK.

Investigador Principal: Olof E. I. Tengblad.

Periodo: enero 2006-diciembre 2007.

European Nuclear Structure Integrated Infrastructure initiative (EURONS).

Código o Referencia: contrato n° 506065.

Entidad Financiadora: EU-VI Programa Marco, RI3 (Integrated Infrastructures).

Investigador Principal: Olof E. I. Tengblad.

Periodo: 2005-2008.

3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Determinación de tasas de transferencia de energía rotacional y parámetros espectroscópicos de moléculas de interés en procesos atmosféricos, astrofísicos y de combustión.

Código o Referencia: FIS2005-02029.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Dionisio Bermejo Plaza.

Periodo: enero 2005-diciembre 2008.

Objetivos: Desarrollo de técnica de población selectiva, mediante bombeo Raman, y seguimiento temporal de la tasa de despoblación colisional, mediante Espectroscopía Raman estimulada, de estados ro-vibracionales moleculares. Medida de tasas de transferencia rotacional en moléculas apolares de interés atmosférico. Medida de ensanchamientos colisionales en las mencionadas moléculas. Comparación de los resultados obtenidos con ambas técnicas.

Espectroscopía Raman estimulada de moléculas ligeras de interés atmosférico: medida y modelización de perfiles de línea.

Código o Referencia: HF2004-0251.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Dionisio Bermejo Plaza.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Pulsed Laser Source in NIR for LIDAR Applications.

Código o Referencia: Participación en contrato ESTEC 1981306/NL/IA

Entidad Financiadora: European Space Agency.

Periodo: abril 2006-septiembre 2007.

Investigador Principal: en el CSIC, Dionisio Bermejo Plaza.

Objetivos: Desarrollo de un Raman *shifter* para desplazar la emisión fundamental de un láser de Nd-YAG o Yb:YAG hasta la zona espectral de 2 μ m en coincidencia espectral con líneas predeterminadas de CO₂ atmosférico. Selección de medio(s) activos apropiados. Propuesta detallada Medidas de laboratorio para evaluar la viabilidad de la propuesta. Simulación numérica de la eficiencia esperada en diferentes configuraciones.

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

Código o Referencia: FIS2004-00456.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Rafael Escribano Torres.

Periodo: abril 2005- mayo 2008.

Objetivos: 1- Formación de cristales de hielo de composición múltiple: $\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3/\text{HCl}$; $\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$, en diversas proporciones y en distintas condiciones de temperatura, fase y espesor. Obtención de los espectros de infrarrojo de estos sistemas. 2- Diseño, construcción y verificación de funcionamiento de una célula de flujo para generación de aerosoles atmosféricos. Primeros resultados sobre sistemas binarios $\text{H}_2\text{O}/\text{HNO}_3$; $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$; $\text{H}_2\text{O}/\text{otros compuestos halogenados}$ (HCl , HBr , HOCl , etc.). Obtención también de los espectros de infrarrojo correspondientes. 3- Estudio teórico de la estructura de los sistemas ternarios mencionados. Estudio de las superficies más adecuadas para la adsorción de moléculas gaseosas en cristales de hidratos de ácido nítrico. Optimización de la adsorción de gases como HCl , ClONO_2 y otros. A partir de las estructuras optimizadas, predicción de los espectros de infrarrojo (frecuencias e intensidades) de los correspondientes cristales, y comparación con los espectros observados. 4- Evaluación del posible impacto de los sistemas múltiples estudiados en las reacciones químicas que ocurren en la estratosfera. Comparación con otros sistemas ya estudiados anteriormente. 5- Generación de plasmas fríos de aire a bajas presiones, puros y con trazas de otras sustancias en estado de vapor. Estudio espectrométrico de las especies neutras y eléctricamente cargadas formadas, 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. 6- Simulación teórica de los resultados obtenidos mediante modelos cinéticos. Comparación con los datos bibliográficos existentes.

Crecimiento cristalino y química de películas de hielo en condiciones extremas.

Código o Referencia: Proyecto Intramural del Frontera (PIF) del CSIC 200550F0051.

Entidad Financiadora: CSIC.

Investigador Principal: Claro Ignacio Sáinz Díaz (Insto. Andaluz de Ciencias de la Tierra)/IP del IEM: Rafael Escribano Torres.

Periodo: noviembre 2005-octubre 2007.

Objetivos: Se pretende profundizar en este campo experimental y teóricamente con el objeto de aclarar cuestiones relacionadas con las propiedades cristalinas, morfológicas y espectroscópicas de los hielos de relevancia atmosférica. Objetivos concretos: Determinación de la estructura cristalográfica del alfa-NAT. A partir de la estructura de rayos X del alfa-NAT, estudio teórico consistente en la obtención de la geometría de equilibrio de la celda unidad, función potencial, y predicción del espectro IR de este sistema utilizando el programa SIESTA. Comparación del espectro calculado con el experimental y asignación del espectro. Estudio experimental: formación de cristales de alfa- y beta-NAT, y exposición a una atmósfera de HCl a distintas presiones y temperaturas. Estudio por espectroscopía de IR, en montaje de reflexión-absorción o transmisión. Estudio teórico: con la misma metodología que en el apartado anterior, se buscarán las superficies de mayor reactividad frente a moléculas de HCl . Paralelamente, estudio teórico, fundamentalmente con el programa GAUSSIAN, de agregados de sistemas ternarios con HNO_3 , HCl y H_2O .

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

Código o Referencia: FIS2004-02576.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Salvador Montero Martín.

Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.

Producción de clusters pequeños de para-hidrógeno en críoexpansión gaseosa.

Código o Referencia: HA2004-0080.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Salvador Montero Martín.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).

Código o Referencia: S-0505/TIC-0191.

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal: Coordinador: F. Cussó/ IP Subproyecto del IEM: Concepción Domingo Maroto.

Periodo: enero 2006-diciembre 2008.

Objetivos: Desarrollo de sensores moleculares basados en SERS y SEIRA.

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

Código o Referencia: Acción Integrada Hispano-Austriaca HU-2004-025.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga (España)/Hinrich Grothe (Austria).
Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: 1- Intento de determinación de la estructura de la fase α del trihidrato de ácido nítrico (NAT) a partir de datos experimentales (espectros IR, difractogramas de rayos X) y cálculos teóricos (DFT). 2- Estudio de efectos de orientación en las capas de hielos depositados (espectros RAIRS con y sin polarización). 3- Estudio experimental y teórico de la zona de vibraciones de baja frecuencia del NAT.

Aplicación de plasmas fríos a dispositivos de fusión: formación de recubrimientos e inhibición y limpieza de películas hidrogenadas.

Código o Referencia: ENE2006-14577-CO4-03/FTN.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga.

Periodo: octubre 2006-septiembre 2009.

Objetivos: 1- Diagnóstico y modelado de plasmas para depósito de películas de carbono hidrogenado. Identificación de especies y mecanismos básicos. Id. para plasmas de limpieza de las películas con especies nitrogenadas. 2- Desarrollo de técnicas de eliminación de películas carbonadas con mezcla de metales de relevancia para ITER.

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

Código o Referencia: FTN2003-08228-C03-03.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología.

Investigador Principal: Isabel Tanarro Onrubia.

Periodo: diciembre 2003-mayo 2007.

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.

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

Código o Referencia: HF2004-0232.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José M. Fernández Sánchez.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Astroquímica en el laboratorio: contribución al satélite HERSCHEL.

Código o Referencia: ESP2004-21060-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José M. Fernández Sánchez.

Periodo: julio 2005-julio 2006.

Control cuántico molecular: aplicaciones de interés tecnológico.

Código o Referencia: FIS2004-02558.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Juan Ortigoso Martínez.

Periodo: abril 2005-marzo 2008.

Objetivos: Desarrollo de modelos teóricos para el control efectivo, mediante campos electromagnético externos, de procesos moleculares que poseen potenciales aplicaciones tecnológicas.

3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

ASTROCAM.

Código o Referencia: S-0505 ESP0237.

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.

Periodo: 2005-2009.

Objetivos: Coordinación de las actividades de los grupos de Astrofísica de la Comunidad de Madrid.

ALMA: preparación de la explotación científica y contribución técnica.

Código o Referencia: AYA 2003-02785.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología.
Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.
Periodo: 2003-2006.
Objetivos: Preparación de la ciencia que se podrá realizar con el interferómetro ALMA.

Agreement for the Development of Software for the Atacama Large Millimetre Array-ALMA.

Código o Referencia: N.Reg. OTT: 20050573.
Entidad Financiadora: ESO.
Investigador Principal: Juan Ramón Pardo Carrión/José Cernicharo Quintanilla.
Periodo: 2005-2008.
Objetivos: Desarrollo de software para la calibración en fase y amplitud de ALMA.

Molecular Universe.

Código o Referencia: MRTN-CT-2004-512302.
Entidad Financiadora: UE.
Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.
Periodo: 2005-2008.
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.

Astrofísica Molecular con Herschel y ALMA.

Código o Referencia: AYA2006-14876.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.
Periodo: diciembre 2006-diciembre 2009.

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

Código o Referencia: AYA2002-10113.
Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología.
Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.
Periodo: 2003-prorrogado.
Objetivos: Desarrollo tecnológico y científico en Radioastronomía.

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

Código o Referencia: ESP2004-00665.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.
Periodo: 2005-2007.
Objetivos: Desarrollo de software para el análisis de los datos de HIFI (Herschel).

Science with ALMA: A New Era for Astrophysics.

Código o Referencia: AYA2005-24101-E.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.
Periodo: 2006.
Objetivos: Financiación complementaria para la organización de Congreso.

Science with ALMA: A New Era for Astrophysics.

Código o Referencia: Acción especial CSIC
Entidad Financiadora: CSIC.
Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.
Periodo: 2006.

Participación en el instrumento MIRI del JWST y proyecto científico asociado.

Código o Referencia: ESP2005-01480.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Luis Colina Robledo.
Periodo 2006-2007.

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.

Calibración criogénica de alta precisión del simulador del instrumento MIRI del JWST.

Código o Referencia: ESP2005-25294-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Luis Colina Robledo.

Periodo 2006-2007.

Objetivos: Medidas de alta precisión en condiciones de alto vacío y temperaturas criogénicas (35K) de la emisión de cuerpos negros de temperatura variable.

Desarrollo y explotación de instrumentación astronómica. ASTRID05.

Código o Referencia: S-0505/ESP-0261.

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid.

Investigador Principal: J. Gallego/Investigador Principal del IEM: Luis Colina Robledo.

Periodo: 2006-2009.

Objetivos: Desarrollos de instrumentación astronómica. Desarrollos de software. Desarrollos de bases de datos y herramientas de minería de datos.

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

Código o Referencia: AYA 2005-00702.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: M^a Luisa Senent Díez.

Periodo: 2006-2008.

Objetivos: Cálculo de las superficies de potencial de moléculas de interés astrofísico y cálculo de estructuras de las cadenas carbonadas Cn.

Cálculos mecano-cuánticos de moléculas de interés astrofísico: preparación del programa científico de Herschel y ALMA.

Código o Referencia: PIE 2006-501082.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: M^a Luisa Senent Díez.

Periodo: 2006.

Objetivos: Cálculo de las superficies de potencial de moléculas de interés astrofísico y cálculo de estructuras de las cadenas carbonadas Cn.

Estrellas masivas en el infrarrojo y radio: modelos y observaciones.

Código o Referencia: AYA2004-08271-C02-02.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología.

Investigador Principal: Francisco Najarro de la Parra.

Periodo: 2004-2007.

Objetivos: Estudio de estrellas masivas en el infrarrojo y radio.

Participación española en el satélite japonés en el infrarrojo lejano SPICA.

Código o Referencia: ESP-2006-26-369-E.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco Najarro de la Parra.

Periodo: septiembre 2006-agosto 2007.

Objetivos: Estudio de la contribución española a SPICA.

Star Formation in Luminous Infrared Galaxies: Giant HII Regions and Superstar Clusters.

Código o Referencia: HST-GO-10169.

Entidad Financiadora: NASA.

Investigador Principal: Almudena Alonso Herrero.

Periodo: 2004-2006.

Objetivos: Interpretación de observaciones de ULIRGs.

Desarrollo de infraestructura Grid para la implementación de una organización virtual de Química Computacional.

Código o 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.

Investigador Principal: Camelia Muñoz Caro (con participación del Dpto.).

Periodo: 2005-2007.

Objetivos: Desarrollo de la infraestructura Grid 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.

Primera ciencia con el GTC: la Astronomía Española en la vanguardia de la Astronomía Europea.

Código o Referencia: CSD2006-0007.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Jose Miguel Rodríguez Espinosa (con participación del Dpto.).

Periodo: 2006-2011.

Data Analysis of IR Emission from Active Galactic Nuclei.

Código o Referencia: ADP NNG04GC83G.

Entidad Financiadora: NASA.

Investigador Principal: M. Elitzur (con participación del Dpto.).

Periodo: 2004-2007.

Objetivos: Interpretación de observaciones de AGNs.

The Most Massive Stars.

Código o Referencia: LTSA04-0000-0008.

Entidad Financiadora: NASA.

Investigador Principal: D. Figer (con participación del Dpto.).

Periodo: 2004-2007.

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

3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

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

Código o Referencia: FIS2004-00108.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: enero 2005-diciembre 2007.

Objetivos: Empleo de metales nanoestructurados para la detección de compuestos de interés medioambiental o pigmentos de interés artístico a nivel de trazas o moléculas aisladas.

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

Código o Referencia: 2004IT0023.

Entidad Financiadora: Acuerdo CSIC/CNR.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: Estudio espectroscópico de flavonoides en relación a su interacción con metales y su efecto antioxidante.

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

Código o Referencia: HI2004-0373 (Acción Integrada España-Italia).

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: Análisis de antibióticos en alimentos mediante espectroscopía SERS.

Cultural Heritage.

Código o Referencia: FP6-513915, Marie Curie Fellowships for Early Stage Training Human Resources and Mobility activities.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: mayo 2005-mayo-2008.

Objetivos: Aplicación de técnicas espectroscópicas vibracionales y electrónicas al estudio de la conservación del Patrimonio Histórico-Artístico.

Métodos analíticos para documentación integral del Arte Rupestre Prehistórico.

Código o Referencia: MADIARP, Proyecto Intramural de Frontera del CSIC.

Entidad Financiadora: CSIC.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Objetivos: Aplicación de técnicas espectroscópicas vibracionales y electrónicas al estudio de la conservación del Patrimonio Histórico-Artístico referente al Arte Rupestre.

Mecanismo de asociación entre ácidos nucleicos y proteínas de interés viral. Estudio por Espectroscopía Raman-Láser e Infrarroja.

Código o Referencia: BQU2003-01690.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Pedro Carmona Hernández.

Periodo: noviembre 2003-noviembre 2006.

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

Espectroscopía de Correlación Bidimensional Infrarroja y Raman de biomoléculas.

Código o Referencia: CTQ2006-04161/BQU.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Pedro Carmona Hernández.

Periodo: octubre 2006-octubre 2009.

Objetivos: Espectroscopía de Correlación Bidimensional Infrarroja y Raman de biomoléculas originada por intercambio isotópico H/D.

Quality Seafood for Improved Consumer Health and Web-Being. SEAFOODplus.

Código o Referencia: FP6-506359.

Entidad Financiadora: UE (VI Programa Marco).

Investigador Principal: Coordinador: Torger Borrensen. Danish Institute for Fisheries Research (DIFRES) (Dinamarca)/Investigador Responsable en el IEM: Pedro Carmona Hernández.

Periodo: 2004-2008.

Objetivos: Mejora de la calidad de alimentos de pescado para el consumidor.

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

Código o Referencia: CBP.EAP.CLG 981232.

Entidad Financiadora: OTAN.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: Funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas mediante moléculas biológicas para la detección de contaminantes.

Funcionalización de superficies amplificadoras de señales vibracionales mediante moléculas receptoras: aplicación a contaminantes persistentes (PAHs y pesticidas).

Código o Referencia: 2005CL0002.

Entidad Financiadora: Acuerdo CSIC-CONICYT (Chile).

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Periodo: enero 2006-diciembre 2007.

Objetivos: Fabricación de sistemas altamente sensible y selectivos para la detección de contaminantes tipo policíclicos aromáticos y pesticidas.

Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas.

Código o Referencia: BFM2006-07894.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José A. Sánchez Gil.

Periodo: octubre 2006-septiembre 2009.

Objetivos: Estudio de procesos en nanofotónica mediados por la excitación de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas.

Ablación y disociación con láseres: estudios fundamentales para aplicaciones tecnológicas.

Código o Referencia: BQU2003-08531-C02-02.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Magna Santos Greve.

Periodo: noviembre 2003-noviembre 2006.

Objetivos: Estudio de la fotoquímica implicada en los procesos de ablación y deposición inducidos por láseres

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

Código o Referencia: 2004CZ0011.

Entidad Financiadora: CSIC.

Investigador Principal: Luis M. Díaz Sol (España) y J. Pola (República Checa).

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: obtención de depósitos nanoestructurados.

Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES) [Véase Dpto. de Física Molecular].

Código o Referencia: S-0505/TIC-0191.

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal: Coordinador: F. Cussó/ IP Subproyecto del IEM: Concepción Domingo Maroto.

Periodo: enero 2006-diciembre 2008.

Objetivos: Desarrollo de sensores moleculares basados en SERS y SEIRA.

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

Código o Referencia: GV05/134.

Entidad Financiadora: Generalitat Valenciana.

Investigador Principal: Sonia Murcia Mascarós (con participación del Dpto.)

Periodo: enero 2005-diciembre 2006.

Objetivos: Aplicación de técnicas de caracterización para el estudio de la degradación de vidrieras.

Dinámica no lineal en sistemas ópticos disipativos.

Código o Referencia: BFM2003-0427.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: José M^a Soto Crespo (con participación del Dpto.)

Periodo: diciembre 2003-noviembre 2006.

Objetivos: Estudio de procesos relacionados con la propagación de solitones en sistemas disipativos, ondas guiadas con amplificación y polaritones superficiales sobre estructuras semiconductoras.

3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

Código o Referencia: FIS2004-01331.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.

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

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

Código o Referencia: ME-1295.

Entidad Financiadora: UE/European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo: 2006-2007.

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

Nanostructure Development in Polymer Systems: Influence of External Constraints.

Código o Referencia: II-04-029EC.

Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo: 2004-2006.

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

Nuevas poliolefinas basadas en copolímeros de etileno.

Código o Referencia: MAT2002-01242.

Entidad Financiadora: MCYT.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Periodo: marzo 2003-octubre 2006.

Objetivos: Polimerización de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas básicos en la física de polímeros y diseño de nuevos materiales con arquitectura controlada.

Dinámica, compatibilidad molecular y nanoestructura de poliolefinas de nueva generación.

Código o Referencia: MAT2006-0400.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Periodo: 2006-2009.

Objetivos: Incorporación de los avances recientes en polimerización al diseño de poliolefinas funcionalizadas, estructuras bimodales de alta resistencia al impacto y compatibilidad con otros polímeros con grupos polares.

Construcción molecular mediante procesos catalizados por complejos organometálicos/Subproyecto GEMPPPO: aplicación al enlace C-C en poliolefinas.

Código o Referencia: S-0505/PPQ/000328.

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal: Pascual Royo García/IP del IEM: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Víctor Cruz Cañas.

Periodo: 2006–2009.

Objetivos: El proyecto tiene como objetivo aunar la experiencia de grupos líderes en la CAM orientando el esfuerzo al desarrollo de nuevos catalizadores organometálicos en diferentes aplicaciones. Nuestro subproyecto se centra en nuevas poliolefinas soportadas en el que se simulan las reacciones de polimerización realizadas por otros grupos y las propiedades físicas de los materiales obtenidos.

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

Código o Referencia: MAT2005-01768.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

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.

Carbon Nanotubes for Future Industrial Composites: Theoretical Potential versus Immediate Application (CNT-NET).

Código o Referencia: G5RT-CT-2001-05026.

Entidad Financiadora: UE.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: 2002–2006.

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

“Structuring Polymers” COST-P12.

Entidad Financiadora: UE.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz y M. Gómez.

Periodo: 2003–2007.

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

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

Código o Referencia: II-03-073EC.

Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: enero 2004-diciembre 2006.

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

Multifunctional Polymeric Materials through Nanostructuring.

Código o Referencia: MERG-CT-2004-511908.

Entidad Financiadora: UE.

Investigador Principal: M. C. García Gutiérrez/Investigador Responsable en el IEM: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: enero 2005-enero 2006.

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

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

Código o Referencia: MAT2004-05865.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: M^a José Capitán Aranda.

Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.

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

Study of Self-Organized Systems on Surface.

Código o Referencia: II-03-071EC.

Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).

Investigador Principal: M^a José Capitán Aranda.

Periodo: enero 2004-diciembre 2006.

Objetivos: Estudio estructural mediante difracción de superficies con rayos X de sistemas auto-organizados.

Sistemas modelo biomiméticos de procesos en superficies.

Código o Referencia: MEC NAN2004-08881-C02-01.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: R. Miranda/Investigador participante en el IEM: M^a José Capitán Aranda.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

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

Nanoestructuras magnéticas: fabricación, propiedades y aplicaciones biomédicas y tecnológicas.

Entidad Financiadora: Comunidad Madrid.

Investigador Principal: R. Miranda/Investigador participante en el IEM: M^a José Capitán Aranda.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2009.

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

Phase Behaviour of Aqueous Dispersions of Mixtures of Ceramide, Cholesterol and Protonated Fatty Acid.

Código o Referencia: I-05-009EC.

Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).

Investigador Principal: E. Melo/Investigador participante en el IEM: M^a José Capitán Aranda.

Periodo: enero 2005-enero 2006.

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

Análisis de la relación estructura-actividad mediante descriptores mecano-cuánticos aplicado a la catálisis homogénea para polimerización de olefinas.

Código o Referencia: 2005CL0049.

Entidad Financiadora: Proyecto conjunto CSIC/Universidad Pontificia de Chile.

Investigador Principal: Víctor Cruz Cañas (España).

Periodo: 2006-2007.

Objetivos: Incorporación de metodologías emergentes de la teoría de funcionales de la densidad conceptual aplicadas al campo de la catálisis metalocénica de polímeros.

Fabricación y optimización de prototipos de pilas de combustible poliméricas (metanol o hidrógeno) basados en sellos elastoméricos y membranas híbridas de elevada conductividad protónica.

Código o Referencia: ENE2004-00081/ALT.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.

Investigador Principal: J. L. Acosta/Investigador participante en el IEM: Amelia Linares Dos Santos.

Periodo: enero 2005-diciembre 2007.

Objetivos: Se trata de desarrollar nuevos materiales poliméricos que, presentando elevada conducción protónica, puedan actuar como membranas en pilas de combustible. Se investigará con polímeros de alta estabilidad térmica y sistemas híbridos. Como combustibles se pretende utilizar tanto el hidrogeno como el metanol directo.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA

Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins.

Empresa: DOW Chemicals.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascañana y Juan F. Vega Borrego.

Periodo: marzo 2006-marzo 2007.

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

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

Código o Referencia: II (EU 3433-APOLYNAIRE)

Empresa: Grupo Antolín-Ingeniería, S.A.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: enero 2006-diciembre 2006.

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

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES

(Subrayado el nombre del ponente).

4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Encuentros de Física Nuclear 2006, Valencia, 6 a 8 de septiembre de 2006.

- *Selfconsistent Variational Methods and Their Applications to Nuclear Beta Decays* (Conferencia invitada), Elvira Moya de Guerra.
- *Mapping of ^{12}C States via the $10\text{B}(3\text{He},p)\alpha\alpha\alpha$ Reaction* (Comunicación oral), Martín Alcorta Moreno.
- *Generalization of Richardson-Gaudin Models to Rank 2 Algebras* (Comunicación oral), Beatriz Errea Subero, S. Lerma, J. Dukelsky, S. Dimitrova, S. Pittel y P. Van Isacker.
- *Multiple Particle Break-Up Studies in the Neutron Rich Li Isotopes* (Comunicación oral), Miguel Madurga Flores.
- *Distribuciones Gamow-Teller en isótopos de Xenon* (Comunicación oral), Óscar Moreno Díaz, R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J. M. Udías y J. R. Vignote.

Meeting on Theory of Molecular and Nuclear Structure, Huelva, 23 a 25 de junio de 2006.

- *Nature of Cooper Pairs from the Exact Solution of the BCS Model* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich.

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

VIII Reunión Nacional de Óptica, Alicante, 18 al 22 de septiembre de 2006.

- *Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles as Substrates for Surface Enhanced Infrared and Raman Spectroscopies* (Póster), Concepción Domingo Maroto, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.
- *Condensación en chorros supersónicos de CO_2 : un estudio cuantitativo mediante scattering Rayleigh y Raman* (Póster), A. Ramos, Guzmán Tejada Gala, J. M. Fernández y S. Montero.

3rd Nanospain Workshop, Pamplona, 20 a 23 de marzo de 2006.

- *Understanding Carbon Nanotube Growth with Photoelectron Spectroscopy* (Comunicación oral), T. de los Arcos, J. W. Seo, M. G. Garnier, P. Oelhafen, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez Cortés.

4.1.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

1 Workshop Especializado ASTROCAM: El satélite HERSCHEL, Villafranca (Madrid), 14 a 15 de diciembre de 2006.

- *Preparatory Science for Herschel* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *El Key Program MAPSO: Cartografía de Orión y SgrB2* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

57 International Astronautical Congress, Valencia, 2006.

- *Participation in the James Webb Space Telescope (JWST) Mid-Infrared Instrument* (Póster), L. Colina, A. Alonso-Herrero, M. García-Marín y Álvaro Labiano Ortega.

Electronic Structure: Principles and Applications, ESPA2006, Santiago de Compostela, 18 a 21 de julio de 2006.

- *Ab Initio Ro-Vibrational Study of Acetic Acid Isomers* (Póster), R. Domínguez-Gómez, M^a Luisa Senent Díez, M. Villa y F.J. Meléndez
- *Ab Initio Study of Carbon Chains* (Póster), Helena Massó González, M^a Luisa Senent Díez, J. R. Goicoechea y J. Cernicharo.
- *C4: A Complete ab Initio Theoretical Study* (Póster), Helena Massó González, M. L. Díez, J. R. Goicoechea y J. Cernicharo.

I Jornada de Radioastronomía Española, Valencia, 10 a 11 de mayo de 2006.

- *ALMA* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.

I Workshop ASTROCAM, Universidad Complutense, Madrid, 30 de noviembre a 1 de diciembre de 2006.

- *El proyecto ALMA* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *Astroquímica en regiones de formación estelar y en los núcleos de galaxias* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.

VII Reunión Científica de la SEA 2006, Barcelona, 12 a 17 de septiembre de 2006.

- *The Formation of Massive Stars in Protoclusters* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.
- *IR8: An Outsider in the Galactic Center* (Comunicación oral) Francisco Najarro Parra y T. R. Geballe.
- *The Quest for Obscured AGN at Cosmological Distances* (Conferencia invitada), Almudena Alonso Herrero.
- *First Measurements of the Electron Density Enhancement Expected in C-Shocks* (Comunicación oral), Izaskun Jiménez Serra.

V Scientific Meeting of the Spanish Astronomical Society, Barcelona, 2006.

- *Environment of Compact Extragalactic Radio Sources* (Comunicación oral), Álvaro Labiano Ortega.

XVIII Canary Islands Winter School, Puerto de la Cruz (Tenerife), 20 de noviembre a 1 de diciembre de 2006.

- *Mid-Infrared T-ReCS Spectroscopy of Local Liras* (Póster), Tanio Díaz Santos.

4.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

3rd Nanospain Workshop, Pamplona, 20 a 23 de marzo de 2006.

- *Ag Nanoparticles Prepared by Laser Photoreduction as Substrates for Surface-Enhanced Raman Spectroscopy* (Póster), Santiago Sánchez-Cortés, M. V. Cañamares y J. V. García-Ramos.
- *Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) by Nanostructured Ag Particles Functionalised with Cationic Self-Assembled Monolayers* (Póster), Luca Guerrini, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.
- *Understanding Carbon Nanotube Growth with Photoelectron Spectroscopy* (Comunicación oral, incluida también en la sección 4.1.3), T. de los Arcos, J. W. Seo, M. G. Garnier, P. Oelhafen, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez Cortés.

CYTALIA. XI Congreso Anual en Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Madrid, 29 de marzo a 1 de abril de 2006.

- *Estudio de los cambios en la estructura del agua mediante Espectroscopía FT-Raman en el proceso de gelificación de surimi* (Póster), I. Sánchez-González, Pedro Carmona Hernández, P. Moreno y M. Careche.
- *Espectroscopía Infrarroja de reflectancia difusa en músculo de sardinas conservadas en hielo* (Comunicación oral), Aranzazu Rodríguez-Casado, P. Carmona, P. Moreno, M. Careche, A. Macagnano y C. Di Natale.

VIII Reunión Nacional de Óptica, Alicante, 18 a 22 de septiembre de 2006.

- *Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles as Substrates for Surface Enhanced Infrared and Raman Spectroscopies* (Póster, incluido también en la sección 4.1.3), Concepción Domingo Maroto, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.
- *Fotónica de plasmones superficiales en metales nanoestructurados y semiconductores microestructurados* (Comunicación oral), José A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, J. Gómez Rivas, E. R. Méndez y A. A. Maradudin.
- *Modelo teórico del mecanismo electromagnético en espectroscopía SERS* (Póster), Vincenzo Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. R. Méndez.

4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

2006–UCM Workshop on Relaxation in Complex Systems, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 26 de junio de 2006.

- *Order and Relaxation in Semicrystalline Polymers* (Comunicación oral), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

III Congreso Nacional de Jóvenes Investigadores en Polímeros (JIP2006), El Ferrol (Coruña), 4 a 8 de junio de 2006.

- *Propiedades físico-químicas y reológicas de copolímeros de etileno/estireno obtenidos con un nuevo catalizador metaloceno* (Comunicación oral), M^a Teresa Expósito Espinosa.

Jornadas “Polímeros de interés tecnológico”, Valladolid, 18 a 20 de octubre de 2006.

- *Química Física de polímeros* (Comunicación oral), Mari Cruz García Gutiérrez.
- Asistencia, Jaime Hernández Rueda.
- *Los plásticos en el siglo XXI* (Comunicación oral), Aurora Nogales Ruiz.

Reunión del Comité Organizador de la Asociación Alexander von Humboldt de España, Madrid, 4 de mayo de 2006.

- Miembro del Comité, Francisco J. Baltá Calleja.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

(Subrayado el nombre del ponente).

4.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

11th Marcel Grossmann Meeting on General Relativity, Berlín (Alemania), 23 a 29 de julio de 2006.

- o *Einstein-Rosen Waves Coupled to Matter* (Comunicación oral), Jesús Fernando Barbero González, I. Garay y E. J. S. Villaseñor.
- o *Unitary Quantization of the Gowdy T3 Model* (Comunicación oral), A. Corichi, J. Cortez y Guillermo A. Mena Marugán.
- o *Computer Algebra for Tensors* (Comunicación oral), José M. Martín García.
- o *xTensor: A Fast Abstract Tensor* (Comunicación oral), José M. Martín García.
- o *Higher-Order Perturbations of Spherical Spacetimes* (Comunicación oral), David Brizuela Cieza, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.
- o *Stability Analysis of Sonic Horizons in Bose-Einstein Condensates* (Comunicación oral), C. Barceló, Andrés Cano, L. J. Garay y G. Jannes.

2006 APS March Meeting, Baltimore (E.E.U.U.), 13 a 17 de marzo de 2006.

- o *Modulation of Luttinger Liquid Exponents in Multi-Walled Carbon Nanotubes* (Póster), José González Carmona y E. Perfetto.
- o *Superconductivity of Multi-Walled Carbon Nanotubes* (Póster), Enrico Perfetto y J. González.

8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors, Dresde (Alemania), 10 a 14 de julio de 2006.

- o *Superconductivity in Multi-Walled Carbon Nanotubes and Doped Graphite* (Póster), Enrico Perfetto y J. González.

Laboratory Cosmology, COSLAB 2006, Leiden (Holanda). 4 a 9 de septiembre de 2006.

- o *Stability of Sonic Horizons in Bose-Einstein Condensates* (Conferencia invitada), C. Barceló, A. Cano, Luis J. Garay y G. Jannes.

New Frontiers in Numerical Relativity, Golm (Alemania), 17 a 21 de julio de 2006.

- o *Well-Posedness of Formulations of the Einstein Equations with Live Gauges* (Conferencia invitada), José M. Martín-García y C. Gundlach.
- o *High-Order Perturbation Theory of a Spherical Spacetime* (Póster), David Brizuela Cieza, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.

Recent Advances in Nonlinear Partial Differential Equations and Applications, Toledo, junio de 2006.

- o *From Geroch Reduction to Quantized Einstein-Rosen Waves* (Póster), J. F. Barbero G., I. Garay y Eduardo J. Sánchez Villaseñor.

XXIX Spanish Relativity Meeting, Palma de Mallorca (España), 4 a 8 de septiembre de 2006.

- o *Second and Higher-Order Perturbations of a Spherical Spacetime* (Comunicación oral), David Brizuela Cieza, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.
- o *Quantization of Linearly Polarized Cosmological Models with Two Killing Vector Fields* (Comunicación oral), J. F. Barbero G., Daniel Gómez Vergel y E. J. S. Villaseñor.
- o *Thermodynamics of Black Holes in Gravity's Rainbow Formalisms* (Comunicación oral), Pablo Galán Sánchez y G. A. Mena Marugán.

4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

13th Nuclear Physics Workshop Marie and Pierre Curie, Kazimierz Dolny (Polonia), 27 de septiembre a 1 de octubre de 2006.

- *Exactly Solvable Pairing Hamiltonians* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich, S. Lerma H., B. Errea, S. Pitte, S. Dimitrova, V. G. Gueorguiev y P. Van Isacker.

18th International IUPAP-Conference on Few-Body Problems in Physics, Santos, Sao Paulo (Brasil), 20 a 26 de agosto de 2006.

- *Decay of Resonances in Three-Body Systems with Charged Particles* (Conferencia invitada), Eduardo Garrido Bellido, D.V. Fedorov y A. S. Jensen.
- *Fingerprints of the Efimov Effect on Three-Body Decay of Resonances* (Póster), Eduardo Garrido Bellido.

25th International Workshop on Nuclear Theory, Rila (Bulgaria), 26 de junio a 1 de julio de 2006.

- *Chaos and 1/f Noise in Quantum Systems* (Conferencia invitada), Armando Relaño Pérez, E. Faleiro, J. M. G. Gómez, R. A. Molina, L. Muñoz y J. Retamosa.
- *Generalization of Richardson-Gaudin Models to Rank-2 Algebras* (Comunicación oral), Beatriz Errea Subero, S. Lerma, J. Dukelsky, S. Dimitrova, P. Van Isacker, S. Pittel y V. G. Gueorguiev.
- *Nucleon Resonances: Study of Their Properties through Photo-Pion Production* (Comunicación oral), César Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.
- *Isospin Mixing, Fermi Transitions and Signatures of Nuclear Deformation within a Mean Field Approach* (Comunicación oral), Raquel Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren y O. Moreno.

3rd Annual Meeting ILIAS/N6-ENTApP, IAP (Inst. d' Astrophysique de Paris), 12 a 14 de diciembre de 2006.

- *Effects of Deformation in Two Neutrino Double Beta Decay* (Comunicación oral), Elvira Moya de Guerra.

3rd Workshop on Shape Phase Transitions and Critical Point Phenomena in Nuclei, Atenas, (Grecia), 9 a 11 de noviembre de 2006.

- *Richardson-Gaudin Models of Interacting Bosons* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich.

Collaboration Meeting DBD06 (ENTApP-ILIAS/N6), Valencia, 28 a 29 de abril de 2006.

- *Double Beta Decay from Nuclear Selfconsistent Shapes* (Comunicación oral), Elvira Moya de Guerra.
- *Effect of Deformation and Residual Interactions on Two-Neutrino Double Beta Decay Matrix Elements* (Comunicación oral), Raquel Álvarez-Rodríguez.
- *Beta Decay in the Neutron-Deficient Lead Region* (Comunicación oral), Óscar Moreno Díaz.

EXL-R3B (Reactions with Relativistic Radioactive Beams) Meeting, Orsay (Francia), 2 a 4 de febrero de 2006.

- *Simulation of the Proton Response of LaBr3 and LYSO* (Comunicación oral), Manuela Turrión Nieves, O. Tengblad y C. Pascual.

EXL Simulation Group Meeting, Madrid, 13 a 14 de junio de 2006.

- *Charge Exchange Reactions and Gamow-Teller Strength* (Comunicación oral), Pedro Sarriguren Suquibide.

Hirschegg '06: Astrophysics and Nuclear Structure, Hirschegg (Austria), 15 a 21 de enero de 2006.

- *Low Lying Resonance States in ^9Be* (Comunicación oral), M^a José García Borge.

Informal Meeting on Nuclear Structure and Many-Body Physics, Madrid, 13 a 15 de marzo de 2006.

- *Gamow-Teller Strength and Nuclear Deformation* (Comunicación oral), Pedro Sarriguren Suquibide.
- *Decay of Resonances in Three-Body Systems with Charged Particles* (Comunicación oral), Eduardo Garrido Bellido.
- *Exact Solution of the Isovector Proton-Neutron Pairing Model* (Comunicación oral), Beatriz Errea Subero, J. Dukelsky, P. Van Isacker, S. Dimitrova y S. Lerma H.
- *Beta Decay in Neutron Deficient Hg, Pb and Po Isotopes* (Comunicación oral), Óscar Moreno Díaz.

International Conference on Frontiers of Nuclear Structure, Shanghai (China), 12 a 17 de junio de 2006.

- *Rank 2 Richardson-Gaudin Models* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich, S. Lerma H., B. Errea, S. Pittel, S. Dimitrova, V. G. Gueorguiev y P. Van Isacker.
- *The Gamow-Teller Response in Deformed Nuclei* (Conferencia invitada), Pedro Sarriguren Suquibide, R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno, E. Moya de Guerra.

ISOLDE Workshop 2006, Ginebra (Suiza), 6 a 8 de febrero de 2006.

- *Updated ISOLDE Yield Database*, Manuela Turrión Nieves.
- *Multiple Particle Break-Up in the ^{11}Li Beta-Decay* (Comunicación oral), Miguel Madurga Flores, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado y K. Riisager.

IV International Conference on Quantum Crystals and Cryocrystals, Krakov (Ucrania) septiembre de 2006.

- *Scattering of Acoustic Phonons in Disordered Matter: An Assessment of the Role of Orientational and Positional Effects* (Conferencia invitada), Francisco J. Bermejo Barrera.

IV International Conference on Quarks and Nuclear Physics (QNP06), Madrid, 5 a 10 de junio de 2006.

- *Analysis of the Quadrupole Deformations of Delta(1232) within an Effective Lagrangian Model for Pion Photoproduction from the Nucleon* (Comunicación oral), César Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.

Nanometer-Sized Dynamic Correlations in Liquids, Okinawa (Japón), 9 a 14 de enero de 2006.

- *Engineering Conferences International* (Conferencia invitada), Francisco J. Bermejo Barrera.

Network PANSI3 (Public Awareness of Nuclear Sciences), GSI, Darmstadt (Alemania), 23 a 28 de abril de 2006.

- *Existing PR Activities of the EURONS Partner IEM (CSIC, Madrid)* (Comunicación oral), Manuela Turrión Nieves.

Nuclear Structure 2006, Oak Ridge (E.E.U.U.), 22 a 30 de julio de 2006.

- *Properties of $^9\text{B}^*$ and $^{12}\text{C}^*$ Determined in β -Decay and in the $10\text{B}(^3\text{He}, p\alpha\alpha\alpha)$ Reaction* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad, M. Alcorta, M. J. G. Borge, M. Madurga y M Turrión.

Nuclei in the Cosmos IX, Ginebra (Suiza), 25 a 30 de junio de 2006.

- *Mapping of ^{12}C States of Astrophysical Interest via the $^{10}\text{B}(^3\text{He}, p)\alpha\alpha\alpha$ Reaction* (Póster), Martín Alcorta Moreno, H. B. Jeppesen, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, G. García, O. Kirsebom, M. Madurga, G. Nyman, D. Obradors y O. Tengblad.
- *Multiple Particle Break-Up Studies in the Neutron Rich Li Isotopes* (Póster), Miguel Madurga Flores, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado y K. Riisager.

Radioactive Nuclear Beams 7, Cortina D'Ampezzo (Italia), 3 a 7 de julio de 2006.

- *Mapping of the $^{12}\text{C}^*$ and $^9\text{B}^*$ States of Astrophysical Interest Via the $^{10}\text{B}(^3\text{He}, p)\alpha\alpha\alpha$ Reaction* (Comunicación oral), M^a José García Borge, M. Alcorta, H. B. Jeppesen, H. O. U. Fynbo, G. García, O. Kirsebom, M. Madurga, G. Nyman, D. Obradors y O. Tengblad.
- *Multiple Particle Break-Up Study of Low Excited States in ^9Be : The Ghost Peak in the ^8Be Excitation Energy Spectrum Visited* (Póster), M. Madurga, M^a José García Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager, O. Tengblad, la colaboración IS-417 y la colaboración TONNERRE.
- *Structure of ^{231}Ac : Measurements of Level Half-Lives* (Póster), R. Boutami, M^a José García Borge, H. Mach, L. M. Fraile, K. Gulda, A. J. Aas, L. M. García Raffi, E. Hagebø, W. Kurcewicz, G. Løvholden, T. Martínez, B. Rubio, J. L. Tain y O. Tengblad.

The ILIAS 3rd Annual Meeting, Gran Sasso Laboratory, Roma (Italia), 28 de febrero a 2 de marzo de 2006.

- *Doble Beta Decay Matrix Elements* (Comunicación oral), Elvira Moya de Guerra.

Wokshop on Neutrino Response Functions, Seattle (E.E.U.U.), 30 de julio a 25 de agosto de 2006.

- *Superscaling in the Coherent Density Fluctuation Model and Extensions to Charged Current Neutrino Scattering* (Conferencia invitada), Elvira Moya de Guerra.

XIII Euroschool on Exotic Beams, Trento (Italia), 11 a 15 de septiembre de 2006.

- *Mapping of ^{12}C States of Astrophysical Interest Via the $^{10}\text{B}(^3\text{He}, p)\alpha\alpha\alpha$ Reaction* (Póster), Martín Alcorta Moreno, H. B. Jeppesen, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, G. García, O. Kirsebom, M. Madurga, G. Nyman, D. Obradors y O. Tengblad.

XV Colloque GANIL, Giens (Francia), 29 de mayo a 1 de junio de 2006.

- *Beta Decay Studies @ the Drip Line* (Conferencia invitada), M^a José García Borge.

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

1st International Workshop on Infrared Plasma Spectroscopy, Greifswald (Alemania), 14 a 16 de junio de 2006.

- *Side Effects in Using Quantum Cascade Lasers for Absorption Spectroscopy* (Póster), S. Welzel, L. Gatilova, M. Hübner, I. Tanarro y J. Röpcke.

20th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2006), Yokohama (Japón), 20 a 25 de Agosto de 2006.

- *Stimulated Raman Spectroscopy Determination of the N₂ Q-Branch Line Broadening Induced by Collisions with H₂ at Various Temperatures* (Póster), L. Gomez, Dionisio Bermejo Plaza, R. Z. Martínez, P. Joubert y J. Bonamy.
- *SERS Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) by Silver Nanoparticles Functionalized with Cationic Self-Assembled Monolayers* (Póster), Concepción Domingo Maroto, L. Guerrini, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, San Petersburgo (Rusia), 15 a 21 de julio de 2006.

- *Strong Rotational-Translational Breakdown of Equilibrium in Hydrogen Supersonic Jets: Molecular Interpretation* (Comunicación oral), Salvador Montero Martín, F. Thibault, G. Tejada y J. M. Fernández.

7th International Congress on Infrared and Raman Users' Group (IRUG7), Nueva York (E.E.U.U.), 28 a 31 de marzo de 2006.

- *Spanish (CSIC) Thematic Network of Cultural Heritage: The IR and Raman Group* (Póster), Concepción Domingo Maroto, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés y M. V. Cañamares.

Deutsche Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie E.V., Erlangen (Alemania), 25 a 27 de mayo de 2006.

- *Untersuchung von Bromoxiden mittels Matrixisolationsspektroskopie und ab initio Rechnungen* (Póster), Óscar Gálvez González, A. Zoermer y H. Grothe.

Escampig XVII, 18th Europhysics Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases, Lecce (Italia), 12 a 16 de julio de 2006.

- *Diagnostic and Modelling of Neutral and Charged Species in H₂ DC Discharges at Low Pressures* (Póster), I Méndez, Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga, Isabel Tanarro Onrubia y F. J. Gordillo-Vázquez.

European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy, Smolenice (República Eslovaca), 9 a 11 de abril de 2006.

- *Temperature Dependence of N₂ Q-Branch Lines Broadening Induced by Collisions with H₂* (Póster), Laura Gómez Martín, Dionisio Bermejo Plaza, P. Joubert y J. Bonamy.

European Geosciences Union General Assembly (EGU 06), Viena (Austria), 24 a 29 de abril de 2006.

- *Exposure of NAT Crystals to HCl: A Spectroscopic Study* (Comunicación oral), Rafael Escribano Torres, D. Fernández-Torre, V. J. Herrero, B. Maté e I. K. Ortega.
- *Theoretical and Experimental Evaluation of Low-frequency Spectra of Nitric Acid Hydrates* (Comunicación oral), Rafael Escribano Torres, D. Fernández-Torre, B. Maté, I. K. Ortega, B. Martín, V. J. Herrero y H. Grothe.
- *Laboratory IR Spectroscopy of Nitric Acid Hydrates Relevant to Polar Stratospheric Cloud (PSC) Research* (Conferencia invitada), Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga.

Heritage, Weathering and Conservation (HWC-2006) Conference, Madrid, 21 a 24 de junio de 2006.

- *A Comprehensive Study on the Discoloration Associated with Laser Cleaning of Stonework* (Póster), P. Pouli, G. Totou, C. Fotakis, S. Gaspard, M. Ouja, M. Castillejo y C. Domingo.

International Symposium on Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS-2006), Nishinomiya (Japón), 28 y 29 de Agosto de 2006.

- *Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles As Substrate for Surface Enhanced Infrared and Raman Spectroscopies* (Póster), Concepción Domingo Maroto, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.
- *Molecular Sensors Based On Surface Enhanced Raman (SERS) and Infrared (SEIRA) Spectroscopies*, José Vicente García-Ramos, M. V. Cañamares, L. Guerrini, Z. Jurasekova, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.

International Workshop on Microplasmas, Greifswald (Alemania), 9 a 11 de mayo de 2006.

- Asistencia, Isabel Tanarro Onrubia.

IV Congreso Ibérico de Espectroscopía-XX Reunión Nacional de Espectroscopía, Ciudad Real, 10 a 14 de septiembre de 2006.

- *A Comparison of Available Optical Constants of Nitric Acid Trihydrate (b-NAT) and Implication for the Detection of Polar Stratospheric Clouds* (Póster), Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga, Ismael K. Ortega Colomer, B. Maté y Rafael Escribano Torres.
- *Vibrational Spectra of Crystalline Hydrates of Atmospheric Relevance. Bands of Hydrated Protons* (Póster), Beatriz Martín Llorente, D. Fernández, Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga, Ismael K. Ortega Colomer, Rafael Escribano Torres y B. Maté.
- *Free Jet Study of Rotational Energy Transfer in CO-CO, CO-Ne and CO-He Collisions at Low Temperatures* (Póster), G. A. Amaral F. J. Aoz, L. Bañares, J. Barr, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Torres, J. E. Verdasco, Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga, Isabel Tanarro Onrubia y B. Martínez-Haya.
- Presidencia de sesión, Isabel Tanarro Onrubia.
- *Kinetics of Atoms and Neutrals in H₂ Plasmas at Low Pressure* (Comunicación oral), I. Méndez, Isabel Tanarro Onrubia, V. J. Herrero y F. J. Gordillo-Vázquez.
- *FTIR Spectroscopy of Atmospheric Aerosols: Preliminary Results* (Póster), M. A. Moreno, V. J. Herrero, B. Maté, Óscar Gálvez González y R. Escribano.
- *A Combined Matrix Isolation and ab Initio Study of Bromine Oxides* (Póster), Óscar Gálvez González, A. Zoermer y H. Grothe.
- *FTIR Spectroscopy and Thermal Programmed Desorption Studies of Astrophysically Relevant Ices* (Comunicación oral), V. Verdejo, Óscar Gálvez González, M. A. Moreno, I. K. Ortega, B. Maté, V. J. Herrero y R. Escribano
- *On Recent Progress in Diagnostics of Molecular Plasmas Using Mid Infrared Diode Lasers* (Conferencia invitada), J. Röpcke, P. B. Davies, S. Glitsch, F. Hempel, N. Lang, U. Macherius, A. Rousseau, G. D. Stancu, I. Tanarro, K.-D. Weltmann, S. Welzel y H. Zimmermann.

Molecular Universe: Lorentz Workshop on Molecular Databases for HERSCHEL, ALMA, and SOFIA, Leiden (Holanda), 5 a 9 de diciembre de 2006.

- *Inelastic Collisions in Low Temperature Molecular Hydrogen* (Comunicación oral), Salvador Montero Martín.

Science with ALMA: A New Era for Astrophysics, Madrid, 13 a 16 de noviembre de 2006.

- *Rotational State-to-State Rates and Spectral Representation for Inelastic H₂:H₂ Collisions at Low Temperature* (Póster), José M. Fernández Sánchez, S. Montero, F. Thibault y G. Tejeda.

The 19th international conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Praga (República Checa) 29 de agosto a 2 de septiembre de 2006.

- *High Resolution Infrared and Raman Spectroscopy of SF₆: The State of the Art in September 2006* (Póster), V. Boudon, J. L. Doménech, D. Bermejo, E. B. Mkadmi, H. Bürger, H. Willner y N. Lacombe.
- *Ro-Translational State-to-State Rates and Spectral Representation for Inelastic H₂:H₂ Collisions at Low Temperature* (Póster), S. Montero, F. Thibault, G. Tejeda y José M. Fernández Sánchez.
- *Stimulated Raman Spectroscopy Determination of the N₂ Q-branch Line Broadening Induced by Collisions with H₂ at Various Temperatures: Measurements and Calculations* (Póster), L. Gómez, R. Z. Martínez, D. Bermejo, F. Thibault, B. Bussery-Honvault, P. Joubert y J. Bonamy

Tsukuba Satellite Symposium on Single Molecule and Tip-Enhanced Raman Scattering, Tsukuba (Japón), 17 a 19 de agosto de 2006.

- Asistencia: Concepción Domingo Maroto.

Winter School in Theoretical Chemistry 2006. Astrochemistry, Helsinki (Finlandia), 11 a 14 de diciembre de 2006.

- *FTIR Spectroscopy and Theoretical Calculation Studies of Astrophysically Relevant Ices* (Póster), Óscar Gálvez González, Beatriz Martín-Llorente, V. Verdejo, M. A. Moreno, I. K. Ortega, B. Maté, V. J. Herrero y R. Escribano.

XIII International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC), Göteborg (Suecia), 23 a 28 de julio de 2006.

- *Quantitative Study of Cluster Growth in Free Jet Expansions of CO₂ by Rayleigh and Raman Scattering* (Póster), Ángel Ramos Gallardo, J. M. Fernández, G. Tejada y S. Montero.

XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy, EUCMOS 2006, Estambul (Turquía), 3 a 8 de septiembre de 2006.

- *Raman Spectroscopy for Characterization of Carbon Nanotubes and Related Composites* (Conferencia invitada), Concepción Domingo Maroto.
- *A Combined Matrix Isolation and ab Initio Study of Bromine Oxides* (Póster), Óscar Gálvez González, A. Zoermer, H. Grothe y A. Loewenschuss.
- *Surface-Enhanced Vibrational Study of Flavonoids of Interest for the Cultural Heritage* (Comunicación oral), Zuzana Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo y J. V. García-Ramos.

4.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

17th International Symposium on Space Terahertz Technology, París (Francia), 9 a 12 de mayo de 2006.

- *Atmospheric Opacity above 1 THz: Evaluation for the ALMA Site and for Laboratory Developments* (Póster), Juan Ramón Pardo Carrión, E. Serabyn, J. Cernicharo y M. Wiedner.

19th UCL Cumberland Lodge Meeting: Astrobiology, Windsor (Reino Unido), julio de 2006.

- *Carbon Chemistry in AGB and Post-AGB Objects: The Case of CRL 618* (Conferencia invitada), Juan Ramón Pardo Carrión.

2006: SPIE- The International Society for Optical Engineering, Orlando, Florida (E.E.U.U.), 24 a 31 de mayo de 2006.

- *Phase Correction for ALMA* (Comunicación oral), A. Stirling, J. Richer, R. Hills y Juan Ramón Pardo Carrión.

38th Midwest Chemistry Conference, Ohio (E.E.U.U.), 2006.

- *Ab Initio Study of Carbon Chains* (Póster), Helena Massó González, M. L. Senent, J. R. Goicoechea, J. Cernicharo, M. Hochlaf y P. Rosmus.

Astrochemistry Young Researchers Meeting, Londres (Reino Unido), 21 de septiembre de 2006.

- *The First Measurements of the Electron Density Enhancement Expected in C-Shocks* (Comunicación oral), Izaskun Jiménez-Serra.

At the Edge of the Universe. Latest Results from the Deepest Astronomical Surveys, Sintra, Lisboa (Portugal), 9 a 13 de octubre de 2006.

- *2D Study of a Representative Sample of Low-z LIRGs Using Integral Field Spectroscopy and High Resolution Images* (Póster), Macarena García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero y A. Monreal-Ibero.

Cosmic Frontiers, Durham (Reino Unido), 27 de mayo a 2 de junio de 2006.

- *The 24Micron Emission as a Star Formation Rate Indicator* (Conferencia invitada), Almudena Alonso Herrero.

Dust and Gas in ULIRGs: Tracing Star Formation and Black Hole Growth at the Centres of Ultraluminous Infrared Galaxies, Cornell University, Ithaca (E.E.U.U.), 17 a 23 de junio de 2006.

- *Optical Studies of ULIRGs* (Conferencia invitada), Luis Colina Robledo.

Evolution and Chemistry of Symbiotic Stars, Binary Post-AGB and Related Objects, Wierzba, Varsovia (Polonia), 26 de agosto a 1 de septiembre de 2006.

- *Millimeterwave Survey of the Protoplanetary Nebulae CRL 618 and Complete Model* (Conferencia invitada), Juan Ramón Pardo Carrión.

ICAMDATA, París (Francia), 12 a 17 de octubre de 2006.

- *TeraHertz Spectroscopy in the Space: New Submillimeter and Far-IR Astronomical Instruments* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

International Astronomical Union Symposium 234, Waikoloa/Kona, Hawaii (E.E.U.U.), 3 a 7 de abril de 2006.

- *Molecular Line Survey of CRL 618 from 80 to 276 GHz and Complete Model* (Póster), Juan Ramón Pardo Carrión y J. Cernicharo.
- *Probing Post-AGB Metamorphosis with NIR Adaptive Optics Imaging* (Comunicación oral), Carmen Sánchez Contreras.

International Symposium on Molecular Spectroscopy, 62nd Meeting, Ohio (E.E.U.U.), 19 a 23 de julio de 2006.

- *Ab Initio Theoretical Study of Carbon Chains* (Comunicación oral), Helena Massó González y M. L. Senent.
- *Astrochemistry with the Umist Database 2005* (Comunicación oral), J. Woodall, M. Agúndez, A. J. Marckwick-Kemper y T. J. Millar.
- *Ethane Asymmetric C-H Stretching Vibrational Spectra* (Comunicación oral), M. Villa, M. L. Senent y R. Hidalgo.

First Light in the Universe, 36th Saas-Fee Advanced Course of the Swiss Society for Astrophysics and Astronomy, Les Diablerets (Suiza), 3 a 8 de abril de 2006.

- Asistencia, Macarena García-Marín.

First Light Science with the GTC, Miami (E.E.U.U.), 28 a 30 de junio de 2006.

- *The Mid-Infrared Properties of Local Luminous Infrared Galaxies* (Conferencia invitada), Almudena Alonso-Herrero.
- *Mid-Infrared T-ReCS Spectroscopy of Local LIRGs* (Comunicación oral), Tanio Díaz Santos.

Galactic Center Workshop 2006, from the Center of the Milky Way to Nearby Low-Luminosity Galactic Nuclei, Bad Honnef (Alemania), 17 a 22 de abril de 2006.

- *Metal Abundances in the Galactic Center* (Conferencia invitada), Francisco Najarro Parra.

GALEV06, Creta (Grecia), 31 de julio a 4 de agosto de 2006.

- *The Quest for Obscured AGN* (Póster), Almudena Alonso Herrero.

Metal Rich Universe, La Palma, 11 a 18 de junio de 2006.

- *Metal Abundances in the Galactic Center* (Conferencia invitada), Francisco Najarro Parra.

Molecular Universe: Lorentz Workshop on Molecular Databases for Herschel, ALMA and SOFIA, Leiden (Holanda), 5 a 12 de diciembre de 2006.

- *Molecular Databases* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

Nobel Symposium “Cosmic Chemistry and Molecular Astrophysics”, Estocolmo (Suecia), 10 a 16 de junio de 2006.

- *O-Bearing Species in Carbon Rich Objects and Viceversa* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

Reunión Molecular Databases for Herschel, ALMA and SOFIA, Leiden (Holanda), 5 a 12 de diciembre de 2006.

- *Circumstellar Envelopes: The Problem of Oxygen* (Comunicación oral), Marcelino Agúndez Chico.

Science with ALMA: A New Era for Astrophysics, Madrid, 13 a 17 de noviembre de 2006.

- *ALMA and the Galactic Center* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.
- *Understanding the Chemical Complexity of the Circumstellar Envelopes of Carbon-Rich AGB Stars: The Case of IRC +10216* (Comunicación oral), Marcelino Agúndez Chico, J. Cernicharo, J. R. Pardo, J. P. Fonfría Expósito, M. Guélin, E. D. Tenenbaum, L. M. Ziurys y A. J. Apponi.
- *High- J V=0 S_{is} Maser Emisión in IRC*10216: A New Case of Infrared Overlaps* (Póster), José Pablo Fonfría Expósito, M. Agúndez, B. Tercero, J. R. Pardo y J. Cernicharo.
- *Revealing the Fingerprints of the Magnetic Precursor of C-Shocks* (Comunicación oral), Izaskun Jiménez-Serra.
- *The Galactic Center Molecular Clouds. A Peculiar Shock Chemistry* (Póster), Miguel Ángel Requena Torres, J. Martín-Pintado, S. Martín, N. Marcelino, I. Jiménez-Serra, R. Mauersberger, A. Rodríguez-Franco, N. J. Rodríguez-Fernández y P. de Vicente.
- *Modeling the Orion KL Survey Carried Out with the IRAM 30 m Telescope* (Póster), Belén Tercero Martínez.

Symposium ALMA: Complex Molecules in the Space, Aarhus (Dinamarca), 8 a 13 de mayo de 2006.

- *Chemical Complexity with ALMA: Looking for New Molecules near the Confusion Limit* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *Alcohol Chemistry in the Galactic Center. Hot Core Chemistry without Hot Cores* (Póster), Miguel Ángel Requena Torres, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, S. Martín, N. J. Rodríguez-Fernández y P. de Vicente.

The Role of Black Holes in Galaxy Formation and Evolution, Potsdam (Alemania), 9 a 13 de septiembre de 2006.

- *Influence of a Young AGN on the Host Evolution* (Comunicación oral), Álvaro Labiano Ortega.

The 19th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Praga (República Checa), 25 de agosto a 2 de septiembre de 2006.

- *Ab Initio Characterization of the C4 Radical* (Póster), H. Massó, M^a Luisa Senent Díez, J. R. Goicoechea, J. Cernicharo, H. Hochlaf y P. Rosmus.
- *Ab Initio Study of the Far-Infrared Spectrum of Ethyl Methyl Ether* (Póster), R. Dominguez-Gomez, R. Ruis, M^a Luisa Senent Díez y M. Villa.
- *Ab Initio Study of Carbon Chains* (Pósters), Helena Massó González, M. L. Senent, J. R. Goicoechea, J. Cernicharo, M. Hochlaf y P. Rosmus.

XXVI Jornadas Chilenas de Química, Universidad de Concepción (Chile), 2006.

- *Una aproximación variacional-numérica al espectro ro-vibracional de moléculas biatómicas* (Comunicación oral), J. R. Letelier y M. L. Senent.

4.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

20th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2006), Yokohama (Japón), 20 a 25 de Agosto de 2006.

- *Surface Plasmon Photonics on Nanostructured Metal Surface*. (Póster), José Vicente García-Ramos, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil y E. R. Méndez.
- *SERS Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) by Silver Nanoparticles Functionalized with Cationic Self-Assembled Monolayers* (Póster, incluido también en la sección 4.2.3), Concepción Domingo Maroto, L. Guerrini, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

5th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications, Charlottesville (E.E.U.U.), 3 a 6 de septiembre de 2006.

- *IR Laser Ablation of Doped Poly(Methyl Methacrylate)* (Póster), S. Gaspard, M. Oujja, E. Rebollar, M. Walczak, L. Díaz-Sol, M. Santos y M. Castillejo.

7th International Congress on Infrared and Raman Users' Group (IRUG7), Nueva York (E.E.U.U.), 28 a 31 de marzo de 2006.

- *Spanish (CSIC) Thematic Network of Cultural Heritage: The IR and Raman Group* (Póster, incluido también en la sección 4.2.3), Concepción Domingo Maroto, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés y M. V. Cañamares.

International Symposium on Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS-2006), Nishinomiya (Japón), 28 y 29 de Agosto de 2006.

- *Molecular Sensors Based On Surface Enhanced Raman (SERS) and Infrared (SEIRA) Spectroscopies* (Conferencia invitada, incluida también en la sección 4.2.3), José Vicente García-Ramos, M. V. Cañamares, L. Guerrini, Z. Jurasekova, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
- *Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles As Substrate for Surface Enhanced Infrared and Raman Spectroscopies* (Póster, incluido también en la sección 4.2.3), Concepción Domingo Maroto, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.

IV Congreso Ibérico de Espectroscopía-XX Reunión Nacional de Espectroscopía, Ciudad Real, 10 a 14 de septiembre de 2006.

- *Synthesis, Structural and Conformational Study of Some Amides Derived from 3-Methyl-3-Azabicyclo(3.2.1)Octan-8a(b)-Amines* (Póster), I. Iriepa, Juana Bellanato Fontecha, A. I. Madrid y E. Gálvez.

- *Modelo teórico del mecanismo electromagnético en Espectroscopía SERS* (Póster), V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, José Vicente García-Ramos y E. R. Méndez.
- *Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) by Ag Nanoparticles Functionalised with Cationic Self-Assembled Monolayers* (Comunicación oral), L. Guerrini, José Vicente García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.
- *Protein Structure and Oxidative Stress as Revealed by FTIR Microspectroscopy* (Póster), A. Rodríguez-Casado, I. Alvarez, A. Toledano, E. De Miguel, y Pedro Carmona Hernández.
- *Real Time Study of Photodissociation of Trisilane and Dimethylselenide Mixtures Induced by IR Laser* (Póster), Luis Díaz Sol, M. Santos, M. Urbanová y J. Pola.
- *Detección de hidrocarburos policíclicos aromáticos mediante Espectroscopía Raman intensificada por superficies metálicas funcionalizadas con sustancias húmicas* (Póster), P. Leyton, M. M. Campos Vallette, J. Gómez-Jeria, E. Clavijo y Santiago Sánchez-Cortés.
- *IR Laser-Induced Chemical Vapour Deposition of Polyselenocarbosilane Films* (Póster), Magna Santos Greve, L. Díaz y J. Pola.
- *Biomolecular Interactions in Hepatitis C Virus Nucleocapsid* (Conferencia invitada), Aranzazu Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.
- *DRIFTS Study in Sardine (Sardina Pilchardus) Muscle during Iced Storage* (Póster), Aranzazu Rodríguez-Casado, P. Carmona, P. Moreno, M. Careche, A. Macagnano y C. Di Natale.
- *Estudio de la degradación del pigmento curcumina en disolución acuosa y sobre nanoestructuras metálicas mediante Espectroscopía de Absorción UV-Visible y SERS* (Póster), M^a. Vega Cañamares Arribas, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés.

Near-Field Optics (NFO-9), Lausanne (Suiza), 10 a 15 de septiembre de 2006.

- *Surface-Plasmon Polariton Scattering from Arrays of Sub-Wavelength Metal Grooves/Ridges* (Póster), José A. Sánchez-Gil, M. Kuttge, J. Gómez Rivas y A. A. Maradudin.
- *Metallic Nanostructures as SERS Substrates and Nano-Antennas* (Póster), V. Giannini, José A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. R. Méndez.

Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS), Cambridge (E.E.U.U.), 26 a 29 de marzo de 2006.

- Sesión específica sobre *Surface Plasmon Photonics*, José A. Sánchez-Gil.
- *Surface-Plasmon Polariton Scattering from Finite Arrays of Nanodefescts on Metal Surfaces* (Comunicación oral), José A. Sánchez-Gil, T. Leskova y A. A. Maradudin.
- *Model of the Electromagnetic Contribution to Surface Enhanced Raman Scattering* (Comunicación oral), Vincenzo Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. R. Méndez.
- *Refraction of Surface Polaritons by a Surface Lens* (Comunicación oral), B. Baumeier, T. Leskova, A. A. Maradudin y J. A. Sánchez-Gil.

Tsukuba Satellite Symposium on Single Molecule and Tip-Enhanced Raman Scattering, Tsukuba (Japón), 17 a 19 de agosto de 2006.

- Asistencia: José Vicente García-Ramos.

Workshop on Laser Interface Interactions and Laser Cleaning, Konstanz (Alemania), 4 a 7 de junio de 2006.

- *Examination of Physicochemical Modifications Induced in the Ir Laser Ablation of Doped Poly(Methyl Methacrylate)* (Conferencia invitada), S. Gaspard, M. Oujja, E. Rebollar, M. Walczak, M. Castillejo, M. Santos y L. Díaz.

XXVIII European Conference on Molecular Spectroscopy, Estambul (Turquía), 3 a 8 de septiembre de 2006.

- *Synthesis, Structural and Conformational Study of Some Amides Derived from 3-Methyl-3-Azabicyclo(3.2.1)Octan-8a(b)-Amines* (Póster), I. Iriepa, Juana Bellanato Fontecha, A. I. Madrid y E. Gálvez.
- Miembro del Comité Internacional de los Congresos Europeos sobre Espectroscopía Molecular: Juana Bellanato Fontecha.
- Asistencia a la Reunión del Comité Internacional: Juana Bellanato Fontecha.
- *Biomolecular Interactions in HCV Nucleocapsid-like Particles as Revealed by Vibrational Spectroscopy* (Conferencia invitada), Pedro Carmona Hernández, A. Rodríguez-Casado, M. Molina, J. Bartolomé y V. Carreño.
- *Surface-Enhanced Spectroscopy on Functionalized Metal Nanostructures* (Conferencia invitada), Santiago Sánchez-Cortés.
- *Structural Changes in Lipids and Proteins of Sardine (Sardina Pilchardus) Muscle during Ice Storage* (Póster), Aranzazu Rodríguez-Casado, P. Carmona, P. Moreno, M. Careche, A. Macagnano y C. Di Natale.

- *Surface-Enhanced Vibrational Study of Flavonoids of Interest for the Cultural Heritage* (Comunicación oral, incluida también en la sección 4.2.3), Zuzana Jurasekova, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo y J. V. García-Ramos.

4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

11 Symposium: Polymere Nanocomposite Charakterisierung, Struktur, Eigenschaften, Halle (Alemania), 11 y 12 de mayo de 2006.

- *Nanostruktur und mikromechanische Eigenschaften von polymeren Nanocompositen* (Conferencia invitada), Francisco J. Baltá Calleja.

2006 APS March Meeting (American Physical Society), Baltimore, Maryland (E.E.U.U.), 13 a 16 de marzo de 2006.

- *Microindentation Studies in Polymers at Very Low Crystallinities* (Conferencia invitada), Francisco J. Baltá Calleja.

232nd ACS National Meeting, San Francisco (E.E.U.U.), septiembre de 2006.

- *New Termination Mechanism for Olefin Polymerization Catalyzed by n-Alkyl (R) Substituted 3-R Indenyl Zirconocenes as Determined by DFT Calculations* (Póster), Victor Cruz Cañas, S. Martínez y J. Martínez-Salazar.

3rd Annual European Rheology Conference, AERC 2006, Creta (Grecia), abril de 2006.

- *Flow Induced Crystallization Regimes and Rheology of Isotactic Polypropylene: Effects of Molecular Architecture* (Comunicación oral), G. W. M. Peters, J. F. Vega y D. G. Hristova.

41st International Congress on Macromolecules (IUPAC; ABP), Río de Janeiro (Brasil), 16 a 21 de julio de 2006.

- *The Influence of the Crystalline Phase on the γ and β Transitions of Branched Polyethylenes* (Comunicación oral), Javier Martínez-Salazar Bascuñana, S. Martín, J. F. Vega, M. T. Expósito y A. Flores.

78th Annual Meeting of The Society of Rheology, Portland, Maine (E.E.U.U.), octubre de 2006.

- *A Molecular Approach to Fully Eradicate Sharkskin Extrudate Distortions in Entangled Polyethylene* (Comunicación oral), Juan F. Vega Borrego, M. T. Expósito y J. Martínez-Salazar.

COST P12 Conference 2006: Crystallization and Structure Formation of Polymers, Mittlewihl Center (Francia), 8 a 11 de octubre de 2006.

- *The Glass Transition of Polyethylene Containing Butyl and Phenyl Side Groups* (Comunicación oral), Javier Martínez-Salazar Bascuñana, A. Flores, J. F. Vega y M. T. Expósito.
- *On the Use of Carbon Nanotubes as Templates for Polymer Crystallization* (Conferencia invitada), Tiberio A. Ezquerro Sanz.
- *Structure Formation in Low Crystallinity Ethylene-1-Octene Copolymers: A Model for Deformation upon Indentation* (Póster), Araceli Flores Aguilar-Amat, V. B. F. Mathot, G. H. Michler, R. Adhikari y F. J. Baltá Calleja.

ECOSS 24 (European Conference on Surface Science), París (Francia), septiembre de 2006.

- *Electronic Structure of Fe₄N (100) p4g (2x2): Spectroscopic Evidence for Subsurface Nitrogen* (Comunicación oral), M^a José Capitán Aranda.

Inter-Academia Conference 2006, Iasi (Rumanía), 25 a 28 de septiembre de 2006.

- *Formation on Layer Structures by Oriented Poly(Ethylene Terephthalate)* (Comunicación oral), T. Asano, T. Uchiyama, N. Suyama, M. M. Alam, M. F. Mina, S. Hennning, A. Flores y F. J. Baltá Calleja.

International Conference on Polymers and Advanced Materials, POLYMEX 2006, Huatulco (México) 5 a 9 de noviembre de 2006.

- *Molecular Structure and Rheology of Ethylene/Styrene Copolymers Obtained from Single-Site Catalyst Systems* (Póster), Javier Martínez-Salazar Bascuñana, J. F. Vega, M. T. Expósito, M. Lobón-Poo, J. Osío Barcina y A. García Gutiérrez.
- *On the Suppression of Extrudate Distortions in Polyethylene with Narrow Molecular Weight Distribution* (Póster), Juan F. Vega Borrego, M. T. Expósito y J. Martínez-Salazar.

JSI (Journal de Surfaces et Interfaces), Berlín (Alemania), febrero de 2006.

- *Croissances de couches minces de CoFe_2O_4 par épitaxie par jets moléculaires assistée par plasma d'oxygène* (Póster), M^a José Capitán Aranda.

Macromoleculares Kolloquium an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Friburgo (Alemania), 23 a 25 de febrero de 2006.

- *Einsatz mikro- und nanoskopischer Techniken zur mikromechanischen Charakterisierung teilkristalliner Polymere* (Comunicación oral), G. H. Michler, R. Godehardt, S. Henning, W. Lebek y F. J. Baltá Calleja.

Panel Review Project (PRP) HASYLAB, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo (Alemania), 15 y 16 de octubre de 2006.

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

Polymer Processing Society 22nd Annual Meeting, Yamagata (Japón), 2 a 6 de julio de 2006.

- *On Line Nanostructure Formation in Multilayered Coextruded Polymer Systems as Revealed by X Ray Scattering Methods* (Conferencia invitada y Presidente de sesión), Francisco J. Baltá Calleja, F. Ania y I. Puente.

Rolduc Polymer Meeting, Rolduc (Holanda), 22 a 25 de octubre de 2006.

- *Long Chain Branching in Ethylene/Styrene Copolymers Obtained from Single-Site Catalyst Systems* (Póster), Javier Martínez-Salazar Bascañana, J. F. Vega, M. T. Expósito, M. Lobón-Poo, J. Osio Barcina y A. García Gutiérrez.

Satellite Meeting of the IV Edition of the Workshop on Non-Equilibrium Phenomena in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials, Pisa (Italia), 15 a 17 de septiembre de 2006.

- *Interrelationships between Order and Mobility in Polymers: The β -relaxation as a Probe to Follow Polymer Crystallization in Model Aliphatic Polyesters* (Conferencia invitada), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

SOLEIL (Sincrotrón francés, GIF-sur-YVETTE), Scientific Advisory Committee (SAC), 11 a 12 de mayo y 23 a 24 de noviembre de 2006.

- Asistencia, Tiberio A. Ezquerro Sanz.

The 7th International Symposium on Functional π -Electron Systems, Osaka, (Japón), 15 a 20 de mayo de 2006.

- *Organization of Discotics Polycyclic Aromatic Hydrocarbons on Surfaces* (Póster), W. Pisula, M. Kastler, D. Wasserfallen, Mari Cruz García Gutiérrez, R. J. Davies, C. Riekel y K. Müllen.

V Humboldt-Kolleg: Ciencia y Humanismo, Alcalá de Henares, Madrid, 19 de mayo de 2006.

- Asistencia, Francisco J. Baltá Calleja.

XV Encuentro Anual de la Asociación Alexander von Humboldt de España. "El papel de la Ciencia básica para el desarrollo tecnológico: Repercusiones en los aspectos sociales y humanísticos", Vilafranca del Penedés (Barcelona), 21 a 24 de septiembre de 2006.

- Presidente del Comité Organizador, Francisco J. Baltá Calleja.
- Asistencia, Araceli Flores Aguilar-Amat.

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

(Nombre, Institución de procedencia y periodo de estancia).

4.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

- ❖ **Prof. Abhay Ashtekar**, Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U., 15 a 20 de octubre de 2006.
- ❖ **Prof. Carsten Gundlach**, University of Southampton, Reino Unido, 7 a 20 de abril de 2006.
- ❖ **Dr. José M. Pé-Curto Velhinho**, Universidade da Beira Interior, Covilha, Portugal, 31 de enero a 3 de febrero de 2006.
- ❖ **Dr. Ulrich Sperhake**, University of Jena, Alemania, 30 de octubre a 21 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Madhavan Varadarajan**, Raman Research Institute, Bangalore, India, 8 a 21 de octubre de 2006.

4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

- ❖ **Prof. A. N. Antonov**, Bulgarian Academy of Sciences, Sofía, Bulgaria, 22 de mayo a 5 de junio de 2006.
- ❖ **Prof. Tarek El Bardouni**, Facultad de Ciencias, Universidad Abdel Malek Essaâdi, Marruecos, 9 a 29 de julio de 2006.
- ❖ **Prof. T. W. Donnelly**, Massachusetts Institute of Technology, E.E.U.U., 30 de mayo a 12 de junio de 2006.
- ❖ **Prof. Guillermo Dussel**, Dpto. de Física, Universidad de Buenos Aires, Argentina, 2 a 16 de septiembre de 2006.
- ❖ **Prof. Brian Fulton**, University of York, Reino Unido, 22 a 25 de marzo de 2006.
- ❖ **Prof. Gerardo Ortiz**, Laboratorio Nacional de los Álamos, E.E.U.U., 15 a 20 de enero de 2006.
- ❖ **Prof. Stuart Pittel**, Bartol Research Institute, Universidad de Delaware, E.E.U.U., 7 de febrero a 29 de julio de 2006.
- ❖ **Prof. A. A. Raduta**, Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucarest, Rumanía, 30 de noviembre a 14 de diciembre de 2006.
- ❖ **Prof. Nicu Sandulescu**, Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucarest, Rumanía, 3 a 28 de julio de 2006.
- ❖ **Prof. F. Simkovic**, Comenius University, Bratislava, Eslovaquia, 23 de abril a 7 de mayo de 2006.
- ❖ **Dr. Bertram Blank**, Centre d'Études Nucléaire de Bordeaux-Gradignan, Burdeos, Francia, 27 a 31 de marzo de 2006.
- ❖ **Dr. J. A. Caballero**, Universidad de Sevilla, España, 2 a 3 de febrero, y 29 de mayo a 2 de junio de 2006.
- ❖ **Dr. Daniel Galaviz Redondo**, Michigan State University, East Lansing, E.E.U.U., 9 a 30 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Martin Hirsch**, IFIC, Valencia, 22 a 24 de marzo de 2006.
- ❖ **Dr. Pankaj Joshi**, University of York, Reino Unido, 18 a 25 marzo de 2006.
- ❖ **Dr. A. H. Raduta**, Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucarest, Rumanía, 30 noviembre a 14 de diciembre de 2006.
- ❖ **Lic. Xavier Barillie**, Universidad de Orsay, Francia, 27 de febrero a 10 de marzo de 2006.
- ❖ **Lic. Bhupender Thakur**, Universidad de Delaware, E.E.U.U., 15 de febrero a 30 de junio de 2006.
- ❖ **Bilal El Bakkari**, Facultad de Ciencias, Universidad Abdel Malek Essaâdi, Marruecos, 9 a 29 de julio, y 19 noviembre a 9 de diciembre de 2006.
- ❖ **A. Kievsky**, INFN, Pisa, Italia, 13 a 18 de marzo de 2006.
- ❖ **Hans Henrik Knudsen**, University of Aarhus, Aarhus, Dinamarca, 15 de septiembre 2006 a 24 de enero de 2007.
- ❖ **John McGrath**, University of York, York, Reino Unido, 20 de septiembre a 15 de diciembre de 2006.
- ❖ **Ossama Meroun**, Facultad de Ciencias, Universidad Abdel Malek Essaâdi, Marruecos, 9 a 29 de julio de 2006.
- ❖ **Gustavo Sarmiento Muñoz**, Universidad del País Vasco, 1 a 3 de marzo, y 8 de noviembre a 20 de diciembre de 2006.
- ❖ **Jerôme Souin**, Centre d'Études Nucléaire de Bordeaux-Gradignan, Burdeos, Francia, 11 a 15 de septiembre de 2006.

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

- ❖ **Dr. Jannine Bonamy**, Université du Franche Comté, Besançon, Francia, 30 de octubre a 5 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Béatrice Bussery-Honvault**, Université du Franche Comté, Besançon, Francia, 30 de octubre a 5 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Tatiana Elizarova**, Academia de Ciencias de Rusia, Rusia, 16 a 23 de marzo de 2006.
- ❖ **Dr. Pierre Joubert**, Université du Franche Comté, Besançon, Francia, 30 de octubre a 5 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Franck Thibault**, Université de Rennes I, Francia, 30 de octubre a 5 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Jan Peter Toennies**, Max-Planck-Intitut für Dynamik und Selbstorganisation, Göttingen, Alemania, 20 a 24 de noviembre de 2006.

4.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

- ❖ **Cecilia Ceccarelli**, Laboratoire d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble, Francia, septiembre de 2006.

- ❖ **Daniel Fabien**, LERMA, Meudon, Francia, marzo de 2006.
- ❖ **Javier R. Goicoechea**, Observatorio de París, ENS, Francia, abril de 2006.
- ❖ **Michel Guelin**, CNRS, IRAM, noviembre de 2006.
- ❖ **Natalia Pilar Hinojosa**, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile, octubre de 2006.
- ❖ **Bertran Lefloch**, Laog, CNRS, Grenoble, Francia, marzo de 2006.
- ❖ **Sergio Martín**, IRAM, 26 de junio a 3 de julio, y 24 a 29 de julio 2006.
- ❖ **A. Monreal-Ibero**, Astrophysikalishes Institut Potsdam, Alemania, marzo, julio y diciembre de 2006 (tres semanas en total).
- ❖ **C. Packham**, Universidad de Florida, E.E.U.U., mayo de 2006 (una semana).

4.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

- ❖ **Prof. Marcelo Campos-Vallette**, Universidad de Chile, Chile, 6 a 27 de septiembre de 2006.
- ❖ **Prof. Pavol Miskovsky**, Universidad de Kosice, Eslovaquia, 6 a 10 de noviembre de 2006.
- ❖ **Prof. Mauricio Tamba**, CNR, Bolonia, Italia, 12 a 17 de junio de 2006.
- ❖ **Dr. Paolo Carletti**, Universidad de Padua, Italia, 16 de marzo a 16 de mayo de 2006.
- ❖ **Dr. Enrica Droghetti**, Universidad de Florencia, Italia, 10 de marzo a 6 de abril de 2006.
- ❖ **Dr. Alessandro Feiss**, Universidad de Florencia, Italia, 10 a 18 de marzo de 2006.
- ❖ **Dr. Jaime Gómez Rivas**, Philips Research Labs and FOM-Institute AMOLF, Eindhoven, Holanda, 22 a 29 de diciembre de 2006.
- ❖ **Dr. Dano Jancura**, Universidad de Kosice, Eslovaquia, 6 a 10 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dr. Dana Pokorna**, Academia de Ciencias de la República Checa, 15 de septiembre a 22 de septiembre de 2006.
- ❖ **Dr. Josef Pola**, Academia de Ciencias de la República Checa, 15 a 22 de septiembre de 2006.
- ❖ **Dr. Armida Torreggiani**, CNR, Bolonia, Italia, 23 a 27 de octubre de 2006.
- ❖ **Dr. Marketa Urbanová**, Academia de Ciencias de la República Checa, 15 a 22 de septiembre de 2006.

4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

- ❖ **Said Bouhelal**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Argelia, 15 de noviembre a 14 de diciembre de 2006.
- ❖ **Lucía Fernández**, CALTECH, Pasadena, CA, E.E.U.U., 19 a 23 de febrero de 2006.
- ❖ **M. Soledad Gutiérrez Oliva**, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago de Chile, Chile, 16 a 30 de septiembre 2006.
- ❖ **Sven Henning**, Universidad de Halle, Alemania, 9 a 17 de enero de 2006.
- ❖ **Friedrich Kremer**, Universidad de Leipzig, Alemania, 17 y 18 de noviembre de 2006.
- ❖ **Jorge I. Martínez Araya**, Universidad Pontificia de Chile, Chile, septiembre a diciembre de 2006.
- ❖ **G. H. Michler**, Universidad de Halle, Alemania, 8 a 10 de junio de 2006.
- ❖ **Kia Ngai**, Naval Research Laboratory, Washington DC, E.E.U.U., 18 a 20 de junio de 2006.
- ❖ **Marco Pieruccini**, C.N.R., Messina, Italia, 25 de octubre a 26 de noviembre de 2006.
- ❖ **Dorian Polo**, Universidad Rey Juan Carlos, junio a julio de 2006.
- ❖ **Jürgen Rühle**, University of Freiburg, IMTEK, Friburgo, Alemania, 8 de septiembre de 2006.
- ❖ **James Runt**, Dpt. of Materials Science and Engineering, Pennsylvania State University, E.E.U.U., 11 de septiembre de 2006.
- ❖ **Michelina Soccio**, Universidad de Bolonia, Italia, 6 de febrero a 31 de julio de 2006.

4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

4.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Prof. Abhay Ashtekar.

Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U.

Quantum Nature of the Big Bang.

Fecha: 17 de octubre de 2006.

Prof. Carsten Gundlach.

University of Southampton, Reino Unido.

Formulations of the Einstein Equations for Binary Black Hole Evolutions.
Fecha: 18 de abril de 2006.

Dr. Marco A. Fontelos.

Universidad Autónoma de Madrid, Madrid.

Singularidades en interfases fluidas.

Fecha: 8 de febrero de 2006.

Dr. José M. Pé-Curto Velhinho.

Universidade da Beira Interior, Covilha, Portugal.

Formal Aspects of Semi-Classical Analysis in Loop Quantum Gravity.

Fecha: 1 de febrero de 2006.

Dr. Ulrich Sperhake.

University of Jena, Alemania.

A Review of Black-Hole Binary Simulations in Numerical Relativity.

Fecha: 15 de marzo de 2006.

Dr. Madhavan Varadarajan.

Raman Research Institute, Bangalore, India.

Quantum Fields at Any Time.

Fecha: 20 de octubre de 2006.

Javier Molina Sánchez.

Universidad de Guelph, Canadá.

Cálculo de la autofuerza electromagnética en espaciotiempo curvo.

Fecha: 27 de marzo de 2006.

Ciclo “International Loop Quantum Gravity Seminars”:

(celebrados por conferencia telefónica junto con otros 13 centros)

- Prof. Abhay Ashtekar.

Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U.

Loop Quantum Gravity: Frequently Asked Questions.

Fecha: 19 de septiembre de 2006.

- Prof. Alejandro Corichi.

Universidad Autónoma de México, Morelia, México.

Quantum Isolated Horizons: The Planck Scale Regime.

Fecha: 14 de noviembre de 2006.

- Prof. Carlo Rovelli.

Centre de Physique Théorique de Marseille, Francia.

Spinfoam Graviton Propagator: Introduction.

Fecha: 26 de septiembre de 2006.

- Dr. Bianca Dittrich.

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.

Approximate Observables.

Fecha: 28 de noviembre de 2006.

- Dr. Robert Oeckl.

Universidad Autónoma de México, Morelia, México.

Quantum Gravity, Probabilities and General Boundaries.

Fecha: 17 de octubre de 2006.

- Dr. Simone Speziale.

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.

Spinfoam Graviton Propagator.

Fecha: 3 de octubre de 2006.

- **Winston Fairbairn.**

Ecole Normale, Lyon, Francia.

Fermions in 3d Spinfoam Quantum Gravity.

Fecha: 7 de noviembre de 2006.

4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Prof. Bertram Blank.

Centre d'Études Nucléaires de Bordeaux-Gradignan, Burdeos, Francia.

Two Proton Radioactivity – A Curiosity of Nature?

Prof. Gerardo Ortiz.

Laboratorio Nacional de los Álamos, E.E.U.U.

Introducción a la información cuántica.

Prof. Nicu Sandulescu.

Institute of Physics and Nuclear Engineering, Bucarest, Rumanía.

Superfluid and Thermal Properties of Neutron Stars.

Prof. Fedor Simkovic.

Comenius University, Bratislava, Eslovaquia.

Double Beta Decay: History, Present and Future.

Prof. Roman Wolski.

Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR, Dubna, Rusia.

Physics with Radioactive Beams at Dubna.

Dr. Daniel Galaviz Redondo.

Michigan State University, East Lansing, E.E.U.U.

Experimental Investigations of the Astrophysical p-Process.

Dr. Martin Hirsch.

IFIC, Valencia.

Particle Physics Aspects of Double Beta Decay.

Dr. Armando Relaño.

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense, Madrid.

Caracterización del caos cuántico mediante series temporales.

A. Kievsky.

INFN, Pisa, Italia.

Variational Description of Bound and Scattering States in Three- and Four- Nucleon Systems.

Yolanda Prezado Alonso.

Hospital Universitario de Salamanca, Salamanca.

La Física Médica en España: El papel del radiofísico en la medicina española. Líneas de investigación.

X. Varillie.

Universidad de Orsay, Francia.

Approximations to Fermion Boson Mixtures.

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Béatrice Bussery-Honvault.

Laboratoire de Physique Moléculaire, Université de Franche-Comté, Besançon, Francia.

Ab Initio Potential Energy Surfaces for Loosely to Strongly Bound Systems.

Fecha: 3 de noviembre de 2006.

J. Peter Toennies.

Max-Planck-Institut für Dynamik und Selbstorganisation, Göttingen, Alemania.

Hydrogen Clusters: Magic Numbers and Superfluid Sizes.

Fecha: 21 de noviembre de 2006.

4.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Michel Guelin.

Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM), Grenoble, Francia.

From Astrochemistry to Cosmology: Present and Future Capabilities of the IRAM Telescopes.

Fecha: 8 de noviembre de 2006.

Cecilia Ceccarelli.

Laboratoire d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble, Francia.

Tracking the Molecular Complexity in Solar-Type Protostars.

Fecha: 10 de noviembre de 2006.

Gary Mamon.

Institut d'Astrophysique de Paris, Francia.

The Dark Matter and Total Mass Profiles of Dwarf Spheroidal and Elliptical Galaxies and Groups and Clusters of Galaxies.

Fecha: 24 de noviembre de 2006.

Raúl Jiménez.

Universidad de Pennsylvania, Dpt. of Physics and Astronomy, Filadelfia, E.E.U.U.

Métodos de determinación de edades y metalicidades en poblaciones estelares de galaxias.

Fecha: 18 de diciembre de 2006.

4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Prof. Friedrich Kremer.

Universidad de Leipzig, Alemania.

Molecular Dynamics of Thin Polymer Films.

Fecha: 17 de noviembre de 2006.

Prof. Kia L. Ngai.

Naval Research Laboratory, Washington DC, E.E.U.U.

Are All Standard Theories and Models of Glass Transition Inadequate?

Fecha: 19 de junio de 2006.

Prof. Jürgen Rühle.

University of Freiburg, IMTEK, Friburgo, Alemania.

From Computer Hard Disks to DNA-Chips: Tailor-Made Surfaces for Microsystems Engineering.

Fecha: 8 de septiembre de 2006.

Prof. James Runt.

Dept. of Materials Science and Engineering, Pennsylvania State University, E.E.U.U.

Dynamics of Multicomponent Polymer Systems Using Broadband Dielectric Spectroscopy.

Fecha: 11 de septiembre de 2006.

Dra. M. Soledad Gutiérrez Oliva.

Laboratorio de Química Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile.

Estudio teórico de reacciones químicas: uso de la TFD.

Fecha: 27 de septiembre de 2006.

D. Jorge Martínez Araya.

Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile.

Aplicación de la teoría del funcional de la densidad conceptual a la etapa de iniciación de polimerización de etileno catalizada por catión metil-bis(ciclopentadienil) de circonio IV.

Fecha: 27 de octubre de 2006.

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

4.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Guillermo A. Mena Marugán.

- Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U., 2 de junio a 15 de junio de 2006.

José M. Martín García.

- Albert Einstein Institut, Golm, Alemania, 10 de julio a 13 de agosto de 2006.
- Laboratorio Nacional de Computação Científica, Petropolis, Brasil, 20 de agosto a 10 de septiembre de 2006.
- University of Southampton, Reino Unido, 26 de septiembre a 13 de octubre de 2006.
- Instituto de Astrofísica de París, Francia, 24 de noviembre a 3 de diciembre de 2006.

David Brizuela Cieza.

- Albert Einstein Institut, Golm, Alemania, 8 de mayo a 30 de agosto de 2006.

Iñaki Garay Elizondo.

- Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U., 13 de octubre a 23 de diciembre de 2006.

4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Francisco J. Bermejo Barrera.

- B. Verkin Institut of Low Temperature Physics and Engineering, Ucrania, septiembre de 2006.

Jorge Dukelsky Bercovich.

- Universidad de Buenos Aires, Argentina, 8 a 18 de diciembre de 2006.

M^a José García Borge.

- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 10 a 19 de noviembre de 2006.

Olof E. I. Tengblad.

- Universidad de York, Reino Unido, 16 a 28 de agosto de 2006.

Eduardo Garrido Bellido.

- Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, Dinamarca, 30 abril a 6 de mayo, y 19 a 24 de noviembre de 2006.

Manuela Turrión Nieves.

- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 13 de enero a 13 de febrero, 4 de abril a 8 de mayo, y 18 de mayo a 20 de julio de 2006.

Elvira Moya de Guerra.

- Laboratorio de Física Nuclear de la Universidad de Zaragoza en Canfranc, 20 a 28 de enero de 2006.
- Institute for Theoretical Physics, Universidad de Tuebingen, Alemania, 18 a 25 de junio de 2006.
- Institute for Nuclear Theory, Universidad de Washington, Seattle, E.E.U.U., 31 de julio a 23 de agosto de 2006.

Aranzazu Maira Vidal.

- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 2 a 19 de noviembre de 2006.

Eva Reillo Sánchez.

- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 3 a 11 de junio, 30 de junio a 10 de julio, y 9 a 19 de noviembre de 2006.
- L'Institut de Recherches Subatomiques (IReS), Estrasburgo, Francia, 17 de octubre a 1 de noviembre, y 20 a 28 de noviembre de 2006.

Martín Alcorta Moreno.

- TRIUMF, Vancouver, British Columbia, Canadá, 1 de octubre a 6 de diciembre de 2006.

Ricardo Domínguez Reyes.

- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 2 a 22 de octubre de 2006.

Beatriz Errea Subero.

- Gran Accélérateur d'Ions Lourds, Caen, Francia, 8 de abril a 7 de junio, y 13 a 21 de noviembre de 2006.

Miguel Madurga Flores.

- KVI, Groeningen, Holanda, 21 de marzo a 7 de abril de 2006.
- Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, 1 de octubre a 16 de diciembre de 2006.

Óscar Moreno Díaz.

- Institute for Theoretical Physics, Universidad de Tuebingen, Alemania, 20 de junio a 20 de septiembre de 2006.

Raquel Álvarez-Rodríguez.

- Universidad Aarhus, Dinamarca, mayo de 2006.

Ángel Perea Pérez.

- Universidad de York, Reino Unido, 16 a 28 de agosto de 2006.
- ISOLDE (CERN), Ginebra, Suiza, 29 de octubre a 8 de noviembre de 2006.

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano Torres.

- Technische Universität Wien, Viena, Austria, 1 a 8 de abril, y 11 a 17 de diciembre de 2006.
- Universidad de Bolonia, Italia, 21 a 30 de abril de 2006.
- Universidad de Cambridge, Cambridge, Reino Unido, 7 de mayo a 16 de noviembre de 2006 (Sabático del MEC).

Concepción Domingo Maroto.

- Universidad de Florencia, Italia, 26 de mayo a 3 de junio de 2006.

Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga

- Technische Universität Wien, Viena, Austria, 1 a 8 de abril, y 11 a 17 de diciembre de 2006.

Isabel Tanarro Onrubia.

- Institut für Niedertemperatur-Plasmaphysik, Greifswald, Alemania, 3 de mayo a 30 de junio de 2006.

Óscar Gálvez González.

- Technische Universität Wien, Viena, Austria, 8 meses hasta febrero de 2006, y 18 a 29 de septiembre de 2006.

Laura Gómez Martín.

- Laboratoire de Physique Moléculaire, Université du Franche-Comté, Besançon, Francia, 30 de marzo a 9 de mayo, y 1 de junio a 1 de agosto de 2006.
- Laboratoire de Physique des Atomes, Lasers, Molécules et Surfaces, Université de Rennes I, Francia, 10 a 31 de mayo, y 20 a 26 de noviembre de 2006.

Beatriz Martín Llorente.

- Department of Earth Sciences, Universidad de Cambridge, Cambridge, Reino Unido, 15 de mayo a 15 de julio de 2006.

Isabel Méndez Sánchez.

- Grupo de Plasmas Fríos y Dusty Plasmas, Universidad Ruhr de Bochum, Alemania, 4 de mayo a 4 de julio de 2006.

Ismael K. Ortega Colomer.

- Technische Universität Wien, Viena, Austria, 1 a 8 de abril de 2006.

4.5.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla.

- Observatorio de Burdeos, Francia, 26 de junio a 7 de julio de 2006, y 25 de septiembre a 4 de octubre de 2006.
- Observatorio de Grenoble, Francia, 26 de julio a 1 de agosto de 2006.

Luis Colina Robledo.

- Universidad de Florida, E.E.U.U., 3 a 16 de julio de 2006.
- Universidad de Cornell, Ithaca, E.E.U.U., 17 a 23 de junio de 2006.

M^a Luisa Senent Díez.

- Observatorio de París-Meudon, París, Francia, 13 a 19 de febrero de 2006.
- Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile, Chile, 6 a 21 de abril de 2006.
- NIST, Washington, E.E.U.U., 24 de junio 1 de julio de 2006.
- Lorentz Center, Leiden, Holanda, 5 a 11 de diciembre de 2006.

Almudena Alonso Herrero.

- University of Arizona, Tucson, E.E.U.U., 2 a 14 de noviembre de 2006.

Juan Ramón Pardo Carrión.

- Observatorio de París, Francia, 27 de febrero a 10 de marzo de 2006, y 17 a 28 de abril de 2006.
- KECK, Kona, Hawaii, E.E.U.U., 1 a 9 de abril de 2006.

Carmen Sánchez Contreras.

- Dpto. Astronomía, CALTECH, Pasadera, California, E.E.U.U., 9 a 15 de abril de 2006.

Fabrice Dayou.

- París, Francia, 8 a 21 de septiembre, y 2 a 12 de diciembre de 2006.

Laura Díez Merino.

- Groningen, Holanda, 29 de agosto a 16 de septiembre de 2006.

David Hurtado Bouza.

- Groningen, Holanda, 29 de agosto a 6 de septiembre, 9 a 19 de septiembre, y 3 a 15 de diciembre de 2006.

Eduardo Sánchez Suárez.

- Groningen, Holanda, 21 de agosto a 22 de septiembre, y 26 de noviembre a 15 de diciembre de 2006.

Marcelino Agúndez Chico.

- Lorentz Center, Leiden, Holanda, 5 a 12 de diciembre de 2006.
- IRAM, Granada, 21 de agosto a 2 de septiembre de 2006.

Aranzazu Amo Baladrón.

- Department of Physics and Astronomy, UCLA, E.E.U.U., 13 de octubre a 22 de diciembre de 2006.

Tanio Díaz Santos.

- Universidad de Florida, Gainesville, E.E.U.U., 28 de mayo a 8 de julio de 2006.

José Pablo Fonfría Expósito.

- Morelia, Michoacán, México, 7 de julio a 8 de septiembre de 2006.

Izaskun Jiménez Serra.

- University Collage London, Londres, Reino Unido, 14 de agosto a 18 de octubre de 2006.

Helena Massó González.

- Columbus, Ohio, E.E.U.U., 8 de mayo a 12 de julio de 2006.
- Lorentz Center, Leiden, Holanda, 2 a 9 de diciembre de 2006.

Miguel Ángel Requena Torres.

- Green Bank Telescope, Green Bank, E.E.U.U., 16 de abril a 3 de mayo de 2006.
- IRAM, Granada, 23 agosto a 1 de septiembre, y 3 a 10 de noviembre de 2006.
- Max Plank Institut fur Radioastronomy, Bonn, Alemania, 13 de septiembre a 16 de diciembre de 2006.

Lucie Vincent.

- París, Francia, 8 de septiembre a 3 de noviembre de 2006, y 15 de diciembre de 2006 a 13 de marzo de 2007.

4.5.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José Vicente García Ramos.

- Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Firenze, Florencia, Italia, 26 de mayo a 3 de junio de 2006.

Luis Díaz Sol.

- Academia de Ciencias de la Republica Checa, Praga, República Checa, 4 a 11 de junio de 2006.

Santiago Sánchez Cortés.

- Universidad de Bolonia, Italia, 20 a 27 de abril de 2006.
- CNR, Bolonia, Italia, 12 a 22 noviembre de 2006.
- Universidad P. J. Safarik de Kosice, Eslovaquia, 30 de septiembre a 6 de noviembre de 2006.
- Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile, 4 a 18 de diciembre de 2006.

José A. Sánchez Gil.

- Center for Nanophotonics, FOM-Institute for Atomic and Molecular Physics (AMOLF), Amsterdam, Holanda, 26 de junio a 3 de julio de 2006.

Magna Santos Greve.

- Academia de Ciencias de la República Checa, Praga, República Checa, 15 a 22 de enero de 2006.

M^a Vega Cañamares Arribas.

- Metropolitan Museum de Nueva York, E.E.U.U., marzo a mayo de 2006.

Vincenzo Giannini.

- Center for Nanophotonics, FOM-Institute for Atomic and Molecular Physics (AMOLF), Amsterdam, Holanda, junio de 2006.

Luca Guerrini.

- International Laser Center, Bratislava, Eslovaquia, 29 de septiembre a 4 de diciembre de 2006.

4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja.

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 4 a 10 de octubre de 2006.
- Martin-Luther-Universität, Halle, Alemania, 29 de octubre a 6 de noviembre de 2006.

Javier Martínez de Salazar Bascañana.

- Universidad Tecnológica de Eindhoven, Holanda, 22 a 28 de octubre de 2006.
- Universidad Nacional Autónoma de México, 13 a 19 de noviembre de 2006.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

Daniel R. Rueda Bravo.

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

Víctor Cruz Cañas.

- Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile, 5 a 19 de diciembre de 2006.

M^a Cruz García Gutiérrez.

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

Aurora Nogales Ruiz.

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

Jaime J. Hernández Rueda.

- Institut de Chimie des Surfaces et Interfaces, Mulhouse, Francia, 15 de junio a 14 de julio de 2006.

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

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Luis J. Garay Elizondo y Francisco J. China.

- Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Relatividad general avanzada y agujeros negros (4,5 créditos).

5.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Francisco Javier Bermejo Barrera.

- Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco/EHU.
Fundamentos del empleo de haces de neutrones para la caracterización de materiales (2 créditos).

M^a José García Borge.

- Curso interuniversitario de Física Nuclear.
Física Nuclear Experimental (4 créditos).

M^a José García Borge y Elvira Moya de Guerra.

- Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Física Nuclear y Fusión (1 crédito).

5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Salvador Montero Martín.

- Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Castilla-la-Mancha (Ciudad Real).
Espectroscopías Láser (3 créditos).

5.1.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla.

- Universidad Autónoma de Madrid.
Astrofísica Molecular (3 créditos).

Francisco Najarro Parra y Artemio Herrero.

- Universidad Autónoma de Madrid.
Atmósferas Estelares. (4 créditos).

5.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José Vicente García Ramos.

- Facultad de Ciencias, UNED.
Espectroscopía Raman: nuevas tendencias y aplicaciones (6 créditos).

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

José González Carmona.

- *Superconductividad en nanotubos de carbono*, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, 16 de febrero de 2006.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Perturbative and Non-Perturbative Treatment of 2+1 Gravity Coupled with Scalars*, ciclo “International Loop Quantum Gravity Seminars” (por conferencia telefónica, con participación de 14 centros), organizado por Louisiana State University, Baton Rouge (E.E.U.U.), 10 de octubre de 2006.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- *Inhomogeneous Quantum Cosmology: The Gowdy T3 Model*, ciclo “International Loop Quantum Gravity Seminars” (por conferencia telefónica, con participación de 14 centros), organizado por Louisiana State University, Baton Rouge (E.E.U.U.), 31 de octubre de 2006.
- *Unitary Evolution in Quantum Cosmology*, Institute for Gravitational Physics and Geometry, Penn State University, University Park (E.E.U.U.), 9 de junio de 2006.

José M. Martín García.

- *Introduction to x Tensor*, curso invitado de 5 clases de 2 horas de duración cada una, Instituto de Astrofísica de París (CNRS), París (Francia), 27 de noviembre a 1 de diciembre de 2006.

Luis J. Garay Elizondo.

- *Gravedad Cuántica*, ciclo de seminarios conjuntos de Física Gravitacional de IEM-UCM-IAA (por conferencia telefónica), Instituto de Astrofísica de Andalucía, CSIC, Granada, 22 de noviembre de 2006.
- *Gravedad cuántica*, VI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 8 de noviembre de 2006.
- *Física de agujeros negros*, Agrupación Astronómica Madrileña, Madrid, 19 de septiembre de 2006.
- *Principios de relatividad y leyes de la física*, Agrupación Astronómica Madrileña, Madrid, 4 de julio de 2006.

David Brizuela Cieza.

- *High-Order Perturbations of a Spherical Spacetime*, Albert Einstein Institut, Golm (Alemania), 31 de mayo de 2006.

5.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *From Cooper Pairs to Richardson-Gaudin Integrable Models*, Institute for Theoretical Physics, Universidad de Tübingen (Alemania), 28 de junio de 2006.

M^a José García Borge.

- *Decay Studies at the Drip Line*, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad de Florencia, Florencia (Italia), 6 de marzo de 2006.

Olof E. I. Tengblad.

- *¹²C* Break-Up Seen from Beta-Decay and Low Energy Reactions*, Mainz (Alemania), 30 de enero de 2006.

C. Cabrillo García.

- *Mecánica Cuántica y procesamiento cuántico de la información para peatones I: dualidad onda-corpúsculo*, Agrupación Astronómica de Madrid, Madrid, 28 de noviembre de 2006.

Armando Relaño Pérez.

- *Orden en el caos*, impartido en el Curso de verano “Caos en Sistemas Clásicos y Cuánticos”, Universidad Complutense de Madrid, El Escorial (Madrid), 18 de julio de 2006.

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano Torres.

- *Spettroscopia di sistema modello di nuvole stratosferiche polari*, Universidad de Bolonia, Bolonia (Italia), 21 de abril de 2006.
- *Spectroscopy of the Atmosphere: Spectroscopic Methods for Monitoring the Atmospheric Pollution*, Curso de 6 horas, Universidad de Bolonia, Bolonia (Italia), 26 a 28 de abril de 2006.

- *Spectroscopy of Ices of Atmospheric and Astrophysical Interest*, Universidad de Cambridge, Cambridge (Reino Unido), 16 de octubre de 2006.

Concepción Domingo Maroto.

- *Espectroscopia Raman de Nanotubos de Carbono*, Instituto de Física Aplicada, CSIC, 27 de enero de 2006.
- *Espectroscopías Infrarroja y Raman sobre superficies metálicas nanoestructuradas: hacia el diseño de sensores químicos moleculares*, Máster en Fotónica, título propio de la Universidad Autónoma de Madrid, 7 de marzo de 2006.
- *Vibrational Spectroscopy*, Curso de Conservación de Patrimonio I, Marie Curie Research Training, Madrid, 10 de marzo de 2006.
- *Infrared Spectroscopy on Nanostructured Metallic Surfaces*, Dipto. di Chimica, Universidad de Florencia, Florencia (Italia), 30 de mayo de 2006.
- *Espectroscopia Raman de Nanotubos de Carbono*, Curso de especialización de Postgrado “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmica”, CSIC, Jaca (Huesca), 19 de junio de 2006.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Plasmas reactivos a baja temperatura: caracterización y diagnóstico*, E.T.S. de Ingenieros de Telecomunicación, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, 17 de febrero de 2006.

5.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla.

- *El proyecto ALMA*, Instituto Fortuny.
- *El Universo Frío*, Cosmocaixa, Alcobendas (Madrid).
- *Moléculas en el Espacio*, Curso para jóvenes con capacidades especiales (Comunidad de Madrid).
- *Química del carbono en el espacio*, Escuela de Verano “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”, Jaca (Huesca), 18 a 23 de junio de 2006.

Jesús Martín-Pintado Martín.

- *La evolución del Universo y el origen de la vida*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), noviembre de 2006.
- *La complejidad química del Universo y el origen de la vida*, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, noviembre de 2006.
- *Últimos avances en astronomía milimétrica y radioastronomía*, Escuela de Verano de la UCM “La instrumentación astronómica y el futuro de la Astrofísica”, El Escorial (Madrid), 31 de julio a 4 de agosto de 2006.

Luis Colina Robledo.

- Mesa Redonda de la Escuela de Verano de la UCM “La instrumentación astronómica y el futuro de la Astrofísica”, El Escorial (Madrid), 31 de julio a 4 de agosto de 2006.

María Luisa Senent Díez.

- *Química Teórica aplicada a la astrofísica: cadenas carbonadas*, Universidad Católica de Chile (Chile), abril de 2006.
- *Química Teórica aplicada a la astrofísica: cadenas carbonadas*, Observatorio del Cerro Calán, Universidad de Chile (Chile), abril de 2006.

5.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

José V. García Ramos.

- *Espectroscopia Raman sobre nanoestructuras metálicas: nuevos sustratos SERS y algunas aplicaciones*, Departamento de Química Física, Universidad de Valladolid, Valladolid, 31 de marzo de 2006. *Detección de PAHs mediante Espectroscopia SERS sobre superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos*, Escuela de Verano “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”, CSIC, Jaca (Huesca), 18 a 23 de junio de 2006.

Santiago Sánchez Cortés.

- *Espectroscopia vibracional sobre superficies metálicas nanoestructuradas (SERS y SEIR): nuevos sustratos y aplicaciones*, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC, Madrid, 4 de abril de 2006.
- *Interaction Between Carbon Materials and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Studied By Surface-Enhanced Techniques*, Escuela de Verano “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”, CSIC, Jaca (Huesca), 18 a 23 de junio de 2006.
- *Surface-Enhanced Spectroscopy on Functionalized Metal Nanostructures*, Universidad de Kosice, Kosice (Eslovaquia), 3 de octubre de 2006.
- *Spettroscopia ottica su nanostrutture metalliche: Applicazione allo studio di sostanze umiche*, Universidad de Bolonia, Bolonia (Italia), 16 de noviembre de 2006.
- *Spettroscopia intensificata da nanostrutture metalliche applicata all’analisi di inquinanti*, Universidad de Florencia, Florencia (Italia), 21 de noviembre de 2006.
- *Espectroscopia Vibracional sobre superficies metálicas nanoestructuradas: Nuevos sustratos y aplicaciones*, Universidad de Chile, Santiago de Chile (Chile), 6 de diciembre de 2006.

José A. Sánchez Gil.

- *Óptica de plasmones superficiales: nanoestructuras metálicas y microestructuras semiconductoras*, Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC, Madrid, 18 de mayo de 2006.
- *Surface Plasmon Optics on Surfaces with Sub-Wavelength Structures*, Center for Nanophotonics, FOM-Institute AMOLF, Amsterdam (Holanda), 27 de junio de 2006.
- *Surface Plasmon Optics on Surfaces with Sub-Wavelength Structures*, Philips Research Laboratories, Eindhoven (Holanda), 28 de junio de 2006.

5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Micromechanical Properties of Confined Polymer Systems Using Synchrotron Radiation Techniques and Nanoindentation Methods*, Universidad de Cleveland (E.E.U.U.), 9 de marzo de 2006.
- *Micromechanical Properties of Confined Polymer Systems Using Synchrotron Radiation Techniques and Nanoindentation Methods*, Universidad de Akron (E.E.U.U.), 10 de marzo de 2006.
- *Advances in Microhardness-Nanostructure Correlations: Polymer Materials and Composites*, Universidad Stony Brook, Nueva York (E.E.U.U.), 17 de marzo de 2006.
- *Nanostructure Development in Confined Polymer Systems Using Synchrotron X-Ray Diffraction Techniques and Nanoindentation Methods*, Kyoto University Uji, Kyoto (Japón), 30 de junio de 2006.
- *Nanostructure Development in Confined Polymer Systems Using Synchrotron X-Ray Diffraction Techniques and Nanoindentation Methods*, Tokyo Institute of Technology, Tokyo (Japón), 7 de julio de 2006.
- *Micromechanical Properties of Polymer Materials and Composites Relating to Nanostructure and Morphology*, Fraunhofer-Institute for Applied Polymer Research, Berlín (Alemania), 18 de julio de 2006.
- *Nanostruktur und mikromechanische messungen an Polymerwerkstoffen und Kompositen*, Universidad de Kassel (Alemania), 19 de diciembre de 2006.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- *Caracterización molecular y estructural de poliolefinas de UHMWPE y funcionalizadas*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 19 de septiembre de 2006.
- *On the Effect of UHMW PE in the Processability of Polyethylenes*, Universidad Tecnológica de Eindhoven (Holanda), 26 de octubre de 2006.
- *Estudio de la transición vítrea del polietileno con grupos butilo y fenilo en la cadena lateral*, Universidad Nacional Autónoma de México (México), 17 de noviembre de 2006.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- *Probing Ordering Processes in Soft Condensed Matter by Means of Time Resolved Methods*, Sincrotrón español ALBA, Barcelona, 14 y 15 de marzo de 2006.
- *Dispersión de Rayos X aplicada al análisis morfológico de nanotubos de carbono, polímeros y sus composites*, Curso de especialización de Postgrado “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”, CSIC, Jaca (Huesca), 18 a 23 de junio de 2006.

Victor Cruz Cañas.

- *Modelización de sistemas catalíticos basados en catalizadores fenoxo-imino para la obtención de poliolefinas de muy alto peso molecular y poliolefinas funcionalizadas*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 1 de febrero de 2006.
- *Estudios QSAR sobre catalizadores zirconoceno con puente silano*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 19 de septiembre de 2006.
- *Aplicación de la metodología 3D-QSAR en el estudio de la reactividad de catalizadores metalocénicos*, Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile (Chile), diciembre de 2006.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *La luz sincrotrón: estructura y propiedades de sistemas poliméricos desde lo nano a lo macro*, Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología, Universidad Rey Juan Carlos, Madrid, marzo de 2006.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Introducción a la reometría capilar y sus aplicaciones*, Seminario CEAST, IZASA S.A., Centro Catalán del Plástico, Barcelona, octubre de 2006.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

5.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

José González Carmona.

- *Propiedades Electrónicas de Nanotubos de Carbono*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Jesús Fernando Barbero González.

- *Gravedad Cuántica*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Guillermo Antonio Mena Marugán.

- *III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia* (Director del curso), curso incluido en el Programa de Postgrado del CSIC, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 5 a 7 de abril de 2006.
- *Cosmología Cuántica de Lazos*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Jerónimo Cortez Quezada.

- *Representación funcional y equivalencia unitaria en Teoría de Campos*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 31 de mayo de 2006.

5.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Jorge Dukelsky Bercovich.

- *Informal Meeting on Nuclear Structure and Many-Body Theories*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 13 a 15 de marzo de 2006.

M^a José García Borge.

- *Estudio de núcleos exóticos: su estructura y modos de desintegración*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.
- *El núcleo: un viaje al centro de la materia*, VI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, 6 de noviembre de 2006.

Pedro Sarriguren Suquilbide.

- *Estructura nuclear e interacciones electro-débiles*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Carlos Cabrillo García.

- *La física de la materia desordenada*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Eduardo Garrido Bellido.

- *Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, CSIC, 6 de abril de 2006.

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Concepción Domingo Maroto.

- *Espectroscopia Infrarroja sobre superficies metálicas nanoestructuradas*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 19 de enero de 2006.

Isabel Tanarro Onrubia.

- *Física Molecular de atmósferas y plasmas*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.
- *Los Plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión*, VI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 8 de noviembre de 2006.

José M. Fernández Sánchez.

- *Espectroscopia Raman en chorros supersónicos*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.

Juan Ortigoso Martínez.

- *Control cuántico de procesos moleculares*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.

5.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla.

- *Workshop Herschel* (Chairman del SOC), Universidad de Leiden, Lorentz Center, Leiden, Holanda, 6 a 9 de diciembre de 2006.

José Cernicharo Quintanilla (Chairman del SOC), **Jesús Martín-Pintado Martín** (Co-Chairman del SOC), **Juan Ramón Pardo Carrión** (Miembro del LOC), **Izaskun Jiménez Serra** (Miembro del LOC) y **Marcelino Agúndez Chico** (Miembro del LOC).

- *Science with ALMA: A new era for Astrophysics*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 13 a 17 de noviembre de 2006.

José Cernicharo Quintanilla (Chairman del SOC), **Jesús Martín-Pintado Martín** (Miembro del SOC) y **Marcelo Castellanos Beltrán** (Miembro del LOC).

- *Workshop Astrocarn*, Instituto de Estructura de la Materia. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 30 de noviembre a 1 de diciembre de 2006.

José Cernicharo Quintanilla (co-Chairman del SOC) y **Marcelo Castellanos Beltrán** (Miembro del LOC).

- *Workshop Astrocarn*, Instituto de Estructura de la Materia. Villafranca, Madrid, 14 a 15 de diciembre de 2006.

Jesús Martín-Pintado Martín.

- *Reunion del ALMA Board*, Ministerio de Educación y Ciencia, Madrid, 15 a 17 de noviembre de 2006.

Luis Colina Robledo.

- *First Light Science with the GTC* (Miembro del SOC), Miami, E.E.U.U., 28 a 30 de junio de 2006.
- *Astrofísica extragaláctica*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Luis Colina Robledo (Chairman del LOC), **Almudena Alonso-Herrero** (Miembro del LOC) y **Álvaro. Labiano Ortega** (Miembro del LOC).

- *CDR Preparatory Meeting of the MIRI/JWST Instrument Consortium*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 21 a 25 de septiembre de 2006.

Francisco Najarro de la Parra.

- *Estrellas masivas*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Marcelino Agúndez Chico.

- *Astrofísica molecular*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Izaskun Jiménez Serra.

- *Formación estelar: galáctica y extragaláctica*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 6 de abril de 2006.

Helena Massó González.

- *38th Midwest Chemistry Conference* (Miembro del LOC). Ohio State University, junio de 2006.

5.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Pedro Carmona Hernández.

- *Aplicaciones de la Espectroscopía Infrarroja y Raman*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.
- *Las Microespectroscopías Infrarroja y Raman como técnicas de biodiagnóstico*, VI Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 7 de noviembre de 2006.

Santiago Sánchez Cortés.

- *Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.
- *Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas* (Organizador), Escuela de Verano, CSIC, Jaca (Huesca), 18 a 23 de junio de 2006.

José A. Sánchez Gil.

- *Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.

Magna Santos Greve.

- *Disociación multifotónica infrarroja*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 5 de abril de 2006.

5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

J. Martínez de Salazar Bascuñana y Juan F Vega Borrego (Organizadores).

- *Introducción a la reometría capilar y sus aplicaciones*, Seminario CEAST, IZASA S.A. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, julio de 2006.

Tiberio A. Ezquerro Sanz y Araceli Flores Aguilar-Amat (Comité Organizador).

- *International Polymer Physics Meeting to Honour Prof. F. J. Baltá Calleja on his 70th Birthday: Advances in Nanostructure and Physical Properties of Polymer Materials and Nanocomposites*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 23 y 24 de octubre de 2006.

Victor Cruz Cañas.

- *Supercomputación: cómo hacer química sin laboratorios*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 7 de abril de 2006.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *La luz sincrotrón como herramienta para el estudio de procesos estructurales y dinámicos en polímeros*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 7 de abril de 2006.



International Polymer Physics Meeting to Honour Prof. F. J. Baltá Calleja on his 70th Birthday

Aurora Nogales Ruiz.

- *La radiación sincrotrón: Ayer, hoy y mañana de la Física de Polímeros.* Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28 de febrero de 2006.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

5.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

M^a José García Borge.

- Representante español en el Comité ISOLDE, CERN, Suiza, 2003-2007.

Elvira Moya de Guerra.

- *Fellow* de la *American Physical Society* (E.E.U.U.), 2006.
- Miembro del Comité Científico Asesor del CSIC.
- Miembro del Comité Nacional de selección de científicos contratados al Programa Ramón y Cajal.
- Miembro del Comité Nacional de selección de científicos contratados al Programa EURYI.
- Miembro del Comité Organizador de la reunión del grupo W1 de ILIAS-ENTApP (Valencia).

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Rafael Escribano Torres.

- Miembro del Comité Científico del congreso internacional *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy* (Europa).
- Miembro del Comité Científico del congreso internacional *International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus (EEUU).

Salvador Montero Martín.

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

Concepción Domingo Maroto.

- Miembro del *Board of Directors* de la European Optical Society (EOS).

- Miembro de la Comisión de Expertos (Física) del Ministerio de Educación y Ciencia.

5.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

José Cernicharo Quintanilla.

- 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 celebró en Madrid en 2006.
- Actualmente entre los 17 investigadores más citados en España. Noticia aparecida en el diario El Mundo el 13/12/2006.

Jesús Martín-Pintado Martín.

- Miembro del equipo del Área de Física y Ciencias del Espacio de la ANEP.

Luis Colina Robledo.

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

5.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Prof. Juana Bellanato Fontecha.

- Premio de la RNE (Reunión Nacional de Espectroscopía) “Jesús Morcillo Rubio”, patrocinado por BRUKER, septiembre de 2006.
- Placa del CSIC como reconocimiento a su labor en Espectroscopía IR y Raman de moléculas orgánicas y biológicas a lo largo de más de cincuenta años en el CSIC, CSIC, Madrid, diciembre de 2006.

5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja.

- Consejero de la Sociedad de Estudios Internacionales (SEI), España, 7 de abril de 2006.

Javier Martínez de Salazar Bascañana.

- Miembro del Comité *Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, desde marzo de 1996.
- Miembro del Consejo Rector del CSIC, Ministerio de Educación y Ciencia, desde marzo de 1999 hasta la fecha.

Tiberio A. Ezquerro Sanz.

- Miembro del *Scientific Advisory Committee* (SAC) del Sincrotrón SOLEIL, Francia, diciembre de 2005-diciembre de 2007.
- Miembro del *Review Panel Committee* del HASYLAB, DESY, Hamburgo, Alemania, octubre de 2006-octubre de 2008.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

5.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Estancias de investigadores del instituto en empresas

M^a Teresa Expósito Espinosa

Lugar: Repsol-YPF.

Fechas: mayo a diciembre de 2006.

Finalidad: trabajo sobre síntesis de polietilenos funcionalizados.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Ponente: Javier Mat3nez-Salazar Bascu3ana.

T3tulo: *Arquitectura molecular y estructura de polietilenos obtenidos mediante s3ntesis dual.*

Colaboraci3n: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: V3ctor Cruz Ca3as.

T3tulo: *Efecto del co-catalizador MAO en la s3ntesis de poliolefinas con catalizadores de centro activo 3nico.*

Colaboraci3n: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

T3tulo: *Reolog3a de polietilenos obtenidos mediante s3ntesis dual.*

Colaboraci3n: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: J. Sancho.

T3tulo: *Efecto del sustituyente en el ligando del catalizador de centro activo 3nico en las caracter3sticas moleculares de poliolefinas.*

Colaboraci3n: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: Javier Mat3nez-Salazar Bascu3ana.

T3tulo: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Structure and Orientation by X-Ray Diffraction.*

Colaboraci3n: **IEM/Dow Chemicals.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

T3tulo: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Literature Results on LLDPE/LDPE Blends.*

Colaboraci3n: **IEM/Dow Chemicals.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Nuria Robledo 3lvaro.

T3tulo: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Preliminary Results of Pure Components.*

Colaboraci3n: **IEM/Dow Chemicals.**

Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Jon Otegui de la Fuente.

T3tulo: *Polietilenos obtenidos mediante s3ntesis dual: estado del arte.*

Colaboraci3n: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Centro Tecnol3gico de Repsol-YPF (M3stoles).

Fecha: 4 de diciembre de 2006.

Informes de transferencia tecnol3gica

Juan Francisco Vega Borrego, M^a Teresa Exp3sito Espinosa, Jon Otegui de la Fuente y Javier Mart3nez-Salazar Bascu3ana.

Polyethylenes from Dual Catalysis.

Repsol-YPF (mayo, 2006).

Nuria Robledo Álvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Preliminary Results of Pure Components.
Dow Chemicals (junio, 2006).

Nuria Robledo Álvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Melt Rheology and Mechanical Properties.
Dow Chemicals (noviembre, 2006).

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS

6.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

1. A. Corichi, J. Cortez, G. A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.
Quantum Gowdy T3 Model: A Uniqueness Result.
Classical Quantum Gravity **23**, 6301-6319 (2006).
2. D. Brizuela, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.
Second and Higher-Order Perturbations of a Spherical Spacetime.
Physical Review D **74**, 044039 [1-17] (2006).
3. P. Galán y G. A. Mena Marugán.
Entropy and Temperature of Black Holes in a Gravity's Rainbow.
Physical Review D **74**, 044035 [1-11] (2006).
4. A. Corichi, J. Cortez y G. A. Mena Marugán.
Quantum Gowdy T3 Model: A Unitary Description.
Physical Review D **73**, 084020 [1-17] (2006).
5. A. Corichi, J. Cortez y G. A. Mena Marugán.
Unitary Evolution in Gowdy Cosmology.
Physical Review D (Rapid Communications) **73**, 041502 [1-5] (2006).
6. C. Barceló, A. Cano, L. J. Garay y G. Jannes.
Stability Analysis of Sonic Horizons in Bose-Einstein Condensates.
Physical Review D **74**, 024008 [1-13] (2006).
7. J. F. Barbero G., D. Gómez Vergel y E. J. S. Villaseñor.
Evolution Operators for Linearly Polarized Two-Killing Cosmological Models.
Physical Review D **74**, 024003 (2006).
8. J. F. Barbero G., I. Garay y E. J. S. Villaseñor.
Probing Quantized Einstein-Rosen Waves with Massless Scalar Matter.
Physical Review D **74**, 044004 (2006).
9. C. Gundlach y J. M. Martín-García.
Well-Posedness of Formulations of the Einstein Equations with Dynamical Lapse and Shift Conditions.
Physical Review D **74**, 024016 (2006).
10. C. Gundlach y J. M. Martín García.
Hyperbolicity of Second-Order in Space Systems of Evolution Equations.
Classical and Quantum Gravity **23**, S387 (2006).
11. J. González y E. Perfetto.
Electronic Instabilities in 3D Arrays of Small-Diameter(3,3) Carbon Nanotubes.
European Physical Journal B **51**, 571 (2006).
12. S. Bellucci, J. González, P. Onorato y E. Perfetto.
Modulation of Luttinger Liquid Exponents in Multi-Walled Carbon Nanotubes.
Physical Review B **74**, 045427 (2006).
13. E. Perfetto y J. González.
Electronic Correlations in Small-Diameter Carbon Nanotubes.
Journal of Physics: Condensed Matter **18**, S2105 (2006).
14. E. Perfetto y J. González.
Theory of Superconductivity in Multi-Walled Carbon Nanotubes.
Physical Review B **74**, 201403(R) (2006)

15. E. Perfetto.
Time-Dependent Evolution of Two Coupled Luttinger Liquids.
Physical Review B **74**, 205123 (2006).
16. S. Bellucci, M. Cini, P. Onorato y E. Perfetto.
Correlated Nanoscopic Josephson Junctions.
Journal of Physics: Condensed Matter **18**, S2069 (2006).
17. S. Bellucci, M. Cini, P. Onorato y E. Perfetto.
Suppression of Electron-Electron Repulsion and Superconductivity in Ultra-Small Carbon Nanotubes.
Journal of Physics: Condensed Matter **18**, S2115 (2006).

6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

18. J. Dukelsky y G. Ortiz.
The Exactly Solvable Richardson Model in the BCS-BEC Crossover.
International Journal of Modern Physics E: Nuclear Physics **15**, 324 (2006).
19. J. Dukelsky, V. G. Gueorguiev, P. Van Isacker, S. Dimitrova, B. Errea y S. Lerma H.
Exact Solution of the Isovector Neutron-Proton Pairing Model.
Physical Review Letters **96**, 072503 (2006).
20. J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos.
Scalar Two-Level Boson Model to Study the Interacting Boson Model Phase Diagram in the Casten Triangle.
Physical Review C **73**, 054305 (2006).
21. J. Dukelsky, G. Ortiz, S. M. A. Rombouts y K. Van Houcke.
Integrable Models for Asymmetric Fermi Superfluids: Emergence of a New Exotic Pairing Phase.
Physical Review Letters **96**, 180404 (2006).
22. S. Pittel y J. Dukelsky.
Exactly Solvable Richardson-Gaudin Models and their Applications.
Physica Scripta **T125**, 91 (2006).
23. S. Lerma H., B. Errea, J. Dukelsky, S. Pittel y P. Van Isacker.
Exactly-Solvable Models of Proton and Neutron Interacting Bosons.
Physical Review C **74**, 024314 (2006).
24. F. Dominguez, C. Esebagg y J. Dukelsky.
Solving the Richardson Equations Close to the Critical Points.
Journal of Physics A: Mathematical and General **39**, 11349 (2006).
25. J. Rotureau, N. Michel, W. Nazarewicz, M. Płoszajczak, y J. Dukelsky.
Density Matrix Renormalization Group Approach for Many-Body Open Quantum Systems.
Physical Review Letters **97**, 110603 (2006).
26. J. Dukelsky, G. Ortiz y S. M. A. Rombouts.
Exact BCS Solution in the BCS-BEC Crossover.
International Journal of Modern Physics B **20**, 5179 (2006).
27. J. Dukelsky, S. Lerma H., B. Errea, S. Pittel, S. Dimitrova, V. G. Gueorguiev y P. Van Isacker.
Rank 2 Richardson-Gaudin Models.
International Journal of Modern Physics E: Nuclear Physics **15**, 1665 (2006).
28. A. N. Antonov, M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren y J. M. Udías.
Scaling Functions and Superscaling in Medium and Heavy Nuclei.
Physical Review C **73**, 047302 [1-4] (2006).

29. O. Moreno, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez y E. Moya de Guerra.
Signatures of Nuclear Deformation in Beta Decay Patterns.
Progress in Particle and Nuclear Physics **57**, 254-256 (2006).
30. R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, L. Pacearescu, A. Faessler y F. Simkovic.
Effect of Deformation on Two-Neutrino Double Beta Decay Matrix Elements.
Progress in Particle and Nuclear Physics **72**, 251-253 (2006).
31. O. Moreno, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez y E. Moya de Guerra.
Beta-Decay in Neutron-Deficient Hg, Pb, and Po Isotopes.
Physical Review C **73**, 054302 [1-11] (2006).
32. O. Moreno, R. Álvarez-Rodríguez, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra, J. M. Udías y J. R. Vignote.
Gamow-Teller Strength Distributions in Xe Isotopes.
Physical Review C **74**, 054308 [1-9] (2006).
33. A. N. Antonov, M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, J. A. Caballero, M. B. Barbaro, J. M. Udías y P. Sarriguren.
Superscaling Analysis of Inclusive Electron Scattering and Its Extension to Charge-Changing Neutrino-Nucleus Cross Sections beyond the Relativistic Fermi Gas Approach.
Physical Review C **74**, 054603 [1-15] (2006).
34. P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez, O. Moreno y E. Moya de Guerra.
The Gamow Teller Response in Deformed Nuclei.
International Journal of Modern Physics E: Nuclear Physics **15**, 1397-1406 (2006).
35. C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.
Hints on the Quadrupole Deformation of the Delta(1232).
Physical Review C **73**, 042201(R) (2006).
36. C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.
Effective Lagrangian Approach to Pion Photoproduction from the Nucleon.
Annals of Physics (NY) **321**, 1408-1456 (2006).
37. L. Chico, R. Pérez-Álvarez y C. Cabrillo.
Low-Frequency Phonons in Carbon Nanotubes: A Continuum Approach.
Physical Review B **73**, 075425 (2006).
38. J. Dawidoski, F. J Bermejo, M. L. Ristig, C. Cabrillo y S. M. Bennington.
Density Dependence of the Momentum Distributions in Liquid Para-Hydrogen.
Physical Review B **73**, 144203 (2006).
39. F. J. Bermejo, I. Bustinduy, S. F. J. Cox, J. S. Lord, C. Cabrillo y M. A. González.
Exploring the Dynamics about the Glass Transition by Muon Spin Relaxation and Muon Spin Rotation.
Journal of Physics: Condensed Matter **18**, 2871 (2006).
40. M. D. Ruiz-Martín, M. Jiménez-Ruiz, F. J. Bermejo y R. Fernández-Perea.
High-Frequency Collective Excitations in Molten and Glassy Te Studied by Inelastic Neutron Scattering.
Physical Review B **73**, 094201 (2006).
41. C. Mondelli, M. A. González, F. Albergamo, M. J. Torralvo, E. Enciso, F. J. Bermejo, R. Fernández-Perea, C. Cabrillo, V. León y M. L. Saboungi.
Collective Excitations in Liquid D-2 Confined within the Mesoscopic Pores of a MCM-41 Molecular Sieve.
Physical Review B **73**, 094206 (2006).
42. J. Gutiérrez, J. M. Barandiarán, F. J. Bermejo, S. P. Cottrell, P. Romano, C. Mondelli, L. Fernández-Barquín y A. Pena.
The Role of Disorder in Fe-Doped CMR Manganites as Explored by Mu SR Spectroscopy.
Physica B: Condensed Matter **374**, 63 (2006).

43. J. Gutiérrez, F. J. Bermejo, J. M. Barandiarán, S. P. Cottrell, P. Romano, C. Mondelli, L. Fernández-Barquín, A. Pena y J. R. Stewart.
Role of Disorder and Competing Ferromagnetic and Antiferromagnetic Interactions in the Magnetic, Electrical, and Dynamic Properties of $La_{0.7}Pb_{0.3}(Mn_{1-x}Fe_x)O_{3,0}$ $0 \leq x \leq 0.2$ Manganites.
Physical Review B **73**, 054433 (2006).
44. F. J. Bermejo, S. L. McInain, I. Bustinduy, J. W. Taylor, J. F. C. Turner, M. D. Ruiz-Martín, C. Cabrillo y R. Fernández-Perea.
Evidence of the Presence of Opticlike Collective Modes in a Liquid from Neutron Scattering Experiments.
Physical Review Letters **96**, 235501 (2006).
45. A. V. Krivchikov, A. N. Yuvschenko, V. G. Manzelii, O. A. Korolyuk, F. J. Bermejo, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea y M. A. González.
Scattering of Acoustic Phonons in Disordered Matter: A Quantitative Evaluation of the Effects of Positional versus Orientational Disorder.
Physical Review B **74**, 060201 (2006).
46. J. Gutiérrez, F. J. Bermejo, N. Veglio, J. M. Barandiarán, P. Romano, C. Mondelli, M. A. González y A. P. Murani.
Structural Correlations in $La_{0.7}Pb_{0.3}(Mn_{1-x}Fe_x)O_3$ Manganites by Small Angle and Polarized Neutron Diffraction.
Journal of Physics: Condensed Matter **18**, 9951 (2006).
47. T. Lindenau, M. L. Ristig, K. Gernoth, J. Dawidoeski y F. J. Bermejo.
The Physics of Liquid Para-Hydrogen.
International Journal of Modern Physics B **20**, 5035 (2006).
48. A. Hiess, M. Jiménez-Ruiz, P. Courtois, R. Currat, J. Kulda y F. J. Bermejo.
ILL's Renewed Thermal Three-Axis Spectrometer IN8: A Review of Its First Three Years on Duty.
Physica B: Condensed Matter **385-386**, 1077 (2006).
49. M. Jiménez-Ruiz, R. Currat, J. Kulda y F. J. Bermejo.
IMPS: A Multianalyser Detector System for the Thermal Three-Axis Spectrometer IN8.
Physica B: Condensed Matter **385-386**, 1086 (2006).
50. E. Garrido, D. V. Fedorov y A. S. Jensen.
Efimov Effect in Nuclear Three-Body Decay Resonances.
Physical Review Letters **96**, 112501 (2006).
51. E. Garrido, D. V. Fedorov, A. S. Jensen y H. O. U. Fynbo.
Anatomy of Three-Body Decay III: Energy Distributions.
Nuclear Physics A **766**, 74-96 (2006).
52. A. Kankainen y O. Tengblad.
Excited States in $31S$ Studied via Beta Decay of $31Cl$.
European Physical Journal A **27**, 67-75, (2006).
53. M. J. G. Borge, Y. Prezado, O. Tengblad, H. O. U. Fynbo, K. Riisager y B. Jonson.
Clarification of the Low-Lying Resonance States of 9Be .
Physica Scripta **T125**, 103-107 (2006).
54. M. J. G. Borge, R. Boutami, L. M. Fraile, K. Gulda, W. Kurcewicz, H. Mach, T. Martínez y B. Rubio.
Beta Decay Half-Life of ^{231}Ra .
Physica Scripta **T125**, 180-181 (2006).
55. H. B. Jeppesen, A. M. Moro, T. Nilsson, F. Ames, P. Van den Bergh, U. C. Bergmann, G. Bollen, M. J. G. Borge, O. Tengblad, M. Turrión et al.
Investigation of the $^9Li + ^2H \rightarrow ^8Li + t$ Reaction at REX-ISOLDE.
Physics Letters B **635**, 17-22 (2006).

56. H. B. Jeppesen, A. M. Moro, U. C. Bergmann, M. J. G. Borge, O. Tengblad, M. Turrión et al. *Study of ^{10}Li via the $^9\text{Li}(^2\text{H},p)$ Reaction at REX-ISOLDE*. *Physics Letters B* **642**, 449-454 (2006).
57. E. Ruchowska, W. A. Plóciennik, J. Zylicz, H. Mach, J. Kvasil, A. Algora, N. Amzal, T. Bäck, M. J. G. Borge, ... E. Nácher, B. Rubio, A. Syntfeld, O. Tengblad et al. *Nuclear Structure of ^{229}Th* . *Physical Review C* **73**, 044326 (2006).

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

58. O. Gálvez, P. C. Gómez y L. F. Pacios. *Theoretical Study of Stratospheric Relevant Anions: Nitrate-Nitric Acid Complexes*. *Journal of Physical Chemistry A* **110**, 3750-3758 (2006).
59. O. Gálvez, A. Zoermer, A. Loewenschuss y H. Grothe. *A Combined Matrix Isolation and ab Initio Study of Some Bromine Oxides*. *Journal of Physical Chemistry A* **110**, 6472-6481 (2006).
60. L. F. Pacios, P. C. Gómez y O. Gálvez. *Variation of Atomic Charges on Proton Transfer in Strong Hydrogen Bonds: The Case of Anionic and Neutral Imidazole-Acetate Complexes*. *Journal of Computational Chemistry* **27**, 1650-1661 (2006).
61. O. Gálvez, A. Zoermer y H. Grothe. *Theoretical Study on the Structure of the BrO Hydrates*. *Journal of Physical Chemistry A* **110**, 8818-8825 (2006).
62. B. Maté, I. K. Ortega, M. A. Moreno, V. J. Herrero y R. Escribano. *Orientation Effects on Nitric Acid Dihydrate Films*. *Journal of Physical Chemistry B* **110**, 7396 (2006).
63. I. K. Ortega, B. Maté, M. A. Moreno, V. J. Herrero y R. Escribano. *Infrared Spectra of Nitric Acid Trihydrate (β -NAT): A Comparison of Available Optical Constants and Implication for the Detection of Polar Stratospheric clouds (PSCs)*. *Geophysical Research Letters* **33**, L19816 (2006).
64. I. K. Ortega, R. Escribano, V. J. Herrero, B. Maté y M. A. Moreno. *Exposure of Nitric Acid Trihydrate Crystals to HCl: A Spectroscopic Study*. *Journal of Geophysical Research* **111**, D13206 (2006).
65. B. Martín-Llorente, D. Fernández-Torre, V. J. Herrero, I. K. Ortega, R. Escribano y B. Maté. *Vibrational Spectra of Crystalline Hydrates of Atmospheric Relevance. Bands of Hydrated Protons*. *Chemical Physics Letters* **427**, 300 (2006).
66. J. M. Granadino Roldán, M. Fernández-Gómez, A. Navarro, R. G. Mosteo y R. M. Escribano. *The Molecular Structure and Vibrational Spectrum of 4-Chloroestirene*. *Journal of Molecular Structure* **789**, 118 (2006).
67. V. J. Herrero, I. K. Ortega, B. Maté, B. Martín-Llorente, R. Escribano y H. Grothe. *Comment on "Theoretical Investigation of the Coexistence of α and β -Nitric Acid Trihydrates (NAT) Molecular Conformations"*. *Chemical Physics* **324**, 210 (2006).
68. G. Di Lonardo, R. Escribano, J. M. Flaud, F. Merkt y M. Quack. *Nineteenth Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy - Salamanca - 11-16 September 2005*. *Molecular Physics* **104**, 2579-2580 (2006).
69. I. Méndez, V. J. Herrero, I. Tanarro y F. J. Gordillo-Vázquez. *Non-Equilibrium Atom and Ion Chemistry in Low Pressure Hydrogen DC Plasmas*.

- Journal of Physical Chemistry A **110**, 6060 (2006).
70. F. J. Aoiz, L. Bañares y V. J. Herrero.
Dynamics of Insertion Reactions of H₂ Molecules with Excited Atoms.
Journal of Physical Chemistry A **110**, 12546 (2006) [Feature Article].
 71. J. M. Fernández, A. Punge, G. Tejada, y S. Montero.
Quantitative Diagnostics of a Methane/Air Mini-Flame by Raman Spectroscopy.
Journal of Raman Spectroscopy **37**, 175–182 (2006).
 72. S. Montero, F. Thibault, G. Tejada y J. M. Fernández.
Ro-Translational State-to-State Rates and Spectral Representation of Inelastic Collisions in Low-Temperature Molecular Hydrogen.
Journal of Chemical Physics **125**, 124301 [1-9] (2006).
 73. D. Carriazo, C. Domingo, C. Martín y V. Rives.
Structural and Texture Evolution with Temperature of Layered Double Hydroxides Intercalated with Paramolybdate Anions.
Inorganic Chemistry **45**, 1243-1251 (2006).
 74. S. Martínez-Ramírez, M. Frías y C. Domingo.
Micro-Raman Spectroscopy in White Portland Cement Hydration: Long Term Study at Room Temperature.
Journal of Raman Spectroscopy **37**, 555-561 (2006).
 75. E. Rebollar, G. Bounos, M. Oujjaa, C. Domingo, S. Georgiou y M. Castillejo.
Influence of Polymer Molecular Weight on the Chemical Modifications Induced by UV Laser Ablation.
Journal of Physical Chemistry B **110**, 14215-14220 (2006).
 76. A. Kaminska, M. Sawczak, M. Oujja, C. Domingo, M. Castillejo y G. Sliwinski.
Pigment Identification of a XIV/XV c. Wooden Crucifix by Means of the Raman Spectroscopic Technique.
Journal of Raman Spectroscopy **37**, 1125–1130 (2006).
 77. L. Gómez, D. Bermejo, P. Joubert y J. Bonamy.
Theoretical and Experimental Analysis of N₂-H₂ Stimulated Raman Spectra.
Molecular Physics **104**, 1869-1878 (2006).
 78. N. Moazzen-Ahmadi, J. L. Doménech y D. Bermejo.
The ν_3 Band of CD₃CD₃: High Resolution Stimulated Raman Spectrum and Global Three Band Analysis.
Chemical Physics Letters **429**, 13-17 (2006).
 79. V. Boudon, J. L. Doménech, A. Ramos, D. Bermejo, H. Willner.
High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the Nu(2), Nu(5) and 2 Nu(6) Bands of ³⁴SF₆.
Molecular Physics **104**, 2653-2661 (2006).
 80. M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, R. J. Davies y T. A. Ezquerra.
Templating of Crystallization and Shear-Induced Self-Assembly of Single-Wall Carbon Nanotubes in a Polymer-Nanocomposite.
Polymer **47**, 341-345 (2006).
 81. V. Cañamares, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Surface-Enhanced Raman Scattering Study of the Adsorption of the Anthraquinone Pigment Carminic Acid Adsorption on Ag Nanoparticles.
Vibrational Spectroscopy **40**, 161-167 (2006).
 82. P. Leyton, J. S. Gómez-Jeria, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo y M. Campos-Vallette.
Carbon Nanotube Bundles as Molecular Assemblies for the Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Surface-Enhanced Resonance Raman Spectroscopy (SERS) and Theoretical Studies.
Journal of Physical Chemistry B **110**, 6470-6474 (2006).

83. S. Martínez-Ramírez, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, M. T. Blanco-Varela y T. Blasco.
Evolution of Ordinary Portland Cement Hydration with Admixtures by Spectroscopic Techniques.
Advances in Cement Research **18**, 111-117 (2006).
84. Z. Jurasekova, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Surface-Enhanced Raman Scattering of Flavonoids.
Journal of Raman Spectroscopy **37**, 1239-1241 (2006).
85. L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Functionalization of Ag Nanoparticles with Dithiocarbamate Calix[4]arene as an Effective Supramolecular Host for the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.
Langmuir **22**, 10924-10926 (2006).
86. M. García-Heras, M. A. Villegas, J. M. A. Caen, C. Domingo y J. V. García-Ramos.
Patination of Historical Stained Window Lead Comes from Different European Locations.
Microchemical Journal **83**, 81-90 (2006).

6.1.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

87. S. S. Kim, D. F. Figer, R. P. Kudritzki y F. Najarro.
The Arches Cluster Mass Function.
Astrophysical Journal **653**, L113-L116 (2006).
88. F. Lique, J. Cernicharo y P. Cox.
The Excitation of SO in Cold Molecular Clouds: TMC-1.
Astrophysical Journal **653**, 1342-1352 (2006).
89. A. Alonso-Herrero, L. Colina, C. Packham, T. Díaz-Santos, G. H. Rieke, J. T. Radomski y C. M. Telesco.
High Spatial Resolution T-ReCS Mid-Infrared Imaging of Luminous Infrared Galaxies.
Astrophysical Journal **652**, L83-L87 (2006).
90. F. Combes, S. García-Burillo, J. Braine, E. Schinnerer, F. Walter, L. Colina y M. Gerin.
High Resolution Observations of a Starburst at $z = 0.223$: Resolved CO(1-0) Structure.
Astronomy & Astrophysics **460**, L49-L52 (2006).
91. T. R. Geballe, F. Najarro, F. Rigaut y J.-R. Roy.
The K-Band Spectrum of the Hot Star in IRS 8: An Outsider in the Galactic Center?
Astrophysical Journal **652**, 370-375 (2006).
92. I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, S. Viti, S. Martín, A. Rodríguez-Franco, A. Faure y J. Tennyson.
The First Measurements of the Electron Density Enhancements Expected in C-Type Shocks.
Astrophysical Journal **650**, L135-L138 (2006).
93. M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero y E. Mediavilla.
Integral Field Spectroscopy of the Luminous Infrared Galaxy Arp 299 (IC 694 + NGC 3690).
Astrophysical Journal **650**, 850-871 (2006).
94. A. Alonso-Herrero, G. H. Rieke, M. J. Rieke, L. Colina, P. G. Pérez-González y S. D. Ryder.
Near-Infrared and Star-forming Properties of Local Luminous Infrared Galaxies.
Astrophysical Journal **650**, 835-849 (2006).
95. M. Agúndez y J. Cernicharo.
Oxygen Chemistry in the Circumstellar Envelope of the Carbon-Rich Star IRC +10216.
Astrophysical Journal **650**, 374-393 (2006).
96. L. Kaper, A. van der Meer y F. Najarro.
VLT/UVES Spectroscopy of Wray 977, the Hypergiant Companion to the X-Ray Pulsar GX301-2.
Astronomy & Astrophysics **457**, 595-610 (2006).

97. J. Cernicharo, J. R. Goicoechea, F. Daniel, M. R. Lerate, M. J. Barlow, B. M. Swinyard, E. F. Van Dishoeck, T. L. Lim, S. Viti y J. Yates.
The Water Vapor Abundance in Orion KL Outflows.
Astrophysical Journal **649**, L33-L36 (2006).
98. E. D. Tenenbaum, A. J. Apponi, L. M. Ziurys, M. Agúndez, J. Cernicharo, J. R. Pardo y M. Guélin.
Detection of C₃O in IRC +10216: Oxygen-Carbon Chain Chemistry in the Outer Envelope.
Astrophysical Journal **649**, L17-L20 (2006).
99. F. Daniel, J. Cernicharo y M.-L. Dubernet.
The Excitation of N₂H⁺ in Interstellar Molecular Clouds. I. Models.
Astrophysical Journal **648**, 461-471 (2006).
100. M. R. Mokiem, A. de Koter, C. J. Evans, J. Puls, S. J. Smartt, P. A. Crowther, A. Herrero, N. Langer, D. J. Lennon, F. Najarro et al.
The VLT-FLAMES Survey of Massive Stars: Mass Loss and Rotation of Early-Type Stars in the SMC.
Astronomy & Astrophysics **456**, 1131-1151 (2006).
101. F. Najarro, D. J. Hillier, J. Puls, T. Lanz y F. Martins.
On the Sensitivity of He I Singlet Lines to the Fe IV Model Atom in O Stars.
Astronomy & Astrophysics **456**, 659-664 (2006).
102. M. A. Requena-Torres, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, S. Martín, N. J. Rodríguez-Fernández y P. de Vicente.
Organic Molecules in the Galactic Center. Hot Core Chemistry without Hot Cores.
Astronomy & Astrophysics **455**, 971-985 (2006).
103. N. J. Rodríguez-Fernández, F. Combes, J. Martín-Pintado, T. L. Wilson y A. Apponi.
Coupling the Dynamics and the Molecular Chemistry in the Galactic Center.
Astronomy & Astrophysics **455**, 963-969 (2006).
104. M. R. Lerate, M. J. Barlow, B. M. Swinyard, J. R. Goicoechea, J. Cernicharo, T. W. Grundy, T. L. Lim, E. T. Polehampton, J.-P. Baluteau, S. Viti y J. Yates.
A Far-Infrared Molecular and Atomic Line Survey of the Orion KL Region.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **370**, 597-628 (2006).
105. P. Fonfría Expósito, M. Agúndez, B. Tercero, J. R. Pardo y J. Cernicharo.
High-J v=0 SiS Maser Emission in IRC +10216: A New Case of Infrared Overlaps.
Astrophysical Journal **646**, L127-L130 (2006).
106. J. Cernicharo, J. R. Pardo y A. Weiss.
A New Water Vapor Megamaser.
Astrophysical Journal **646**, L49-L52 (2006).
107. S. Martín, R. Mauersberger, J. Martín-Pintado, C. Henkel y S. García-Burillo.
A 2 Millimeter Spectral Line Survey of the Starburst Galaxy NGC 253.
Astrophysical Journal Supplement Series **164**, 450-476 (2006).
108. D. F. Figer, J.W. MacKenty, R. Massimo, K. Smith, F. Najarro, R. P. Kudritzki y A. Herrero.
Discovery of an Extraordinarily Massive Cluster of Red Supergiants.
Astrophysical Journal **643**, 1166-1179 (2006).
109. F. Najarro, A. Herrero y E. Verdugo.
Massive Stars in the UV.
Astrophysics and Space Science **303**, 153-170 (2006).
110. A. I. Gómez de Castro, A. Lecavelier, M. D'Avillez, J. L. Linsky y J. Cernicharo.
UV Capabilities to Probe the Formation of Planetary Systems: From the ISM to Planets.
Astrophysics and Space Science **303**, 33-52 (2006).

111. F. Lique, A. Spielfiedel y J. Cernicharo.
Rotational Excitation of Carbon Monosulfide by Collisions with Helium.
Astronomy & Astrophysics **451**, 1125-1132 (2006).
112. J. Cernicharo, J. R. Goicoechea, J. R. Pardo y A. Asensio-Ramos.
Warm Water Vapor around Sagittarius B2.
Astrophysical Journal **642**, 940-953 (2006).
113. P. F. Roche, C. Packham, C. M. Telesco, J. T. Radomski, A. Alonso-Herrero, D. K. Aitken, L. Colina y E. Perlman.
Mid-Infrared, Spatially Resolved Spectroscopy of the Nucleus of the Circinus Galaxy.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **367**, 1689-1698 (2006).
114. J. R. Goicoechea, J. Cernicharo, M. R. Lerate, F. Daniel, M. J. Barlow, B. M. Swinyard, T. L. Lim, S. Viti y J. Yates.
Far-Infrared Excited Hydroxyl Lines from Orion KL Outflows.
Astrophysical Journal **641**, L49-L52 (2006).
115. A. Tanner, D. F. Figer, F. Najarro, R. P. Kudritzki, D. Gilmore, M. Morris, E. E. Becklin, I. S. McLean, A. M. Gilbert, J. Graham et al.
High Spectral Resolution Observations of the Massive Stars in the Galactic Center.
Astrophysical Journal **641**, 891-904 (2006).
116. J. Graciá-Carpio, S. García-Burillo, P. Planesas y L. Colina.
Is HCN a True Tracer of Dense Molecular Gas in Luminous and Ultraluminous Infrared Galaxies?
Astrophysical Journal **640**, L135-L138 (2006).
117. S. Martín, J. Martín-Pintado y R. Mauersberger.
Methanol Detection in M 82.
Astronomy & Astrophysics **450**, L13-L16 (2006).
118. J. H. Knapen, L. M. Mazzuca, T. Böker, I. Shlosman, L. Colina, F. Combes y D. J. Axon.
Massive Star Formation in the Central Regions of Spiral Galaxies.
Astronomy & Astrophysics **448**, 489-498 (2006).
119. A. Usero, S. García-Burillo, J. Martín-Pintado, A. Fuente y R. Neri.
Large-Scale Molecular Shocks in Galaxies: The SiO Interferometer Map of IC 342.
Astronomy & Astrophysics **448**, 457-470 (2006).
120. S. Simón-Díaz, A. Herrero, C. Esteban y F. Najarro.
Detailed Spectroscopic Analysis of the Trapezium Cluster Stars inside the Orion Nebula. Rotational Velocities, Stellar Parameters, and Oxygen Abundances.
Astronomy & Astrophysics **448**, 351-366 (2006).
121. A. Alberdi, L. Colina, J. M. Torrelles, N. Panagia, A. S. Wilson y S. T. Garrington.
Evolution of the Circumnuclear Radio Supernova SN 2000ft in NGC 7469.
Astrophysical Journal **638**, 938-945 (2006).
122. A. Monreal-Ibero, S. Arribas y L. Colina.
LINER-like Extended Nebulae in ULIRGs: Shocks Generated by Merger-Induced Flows.
Astrophysical Journal **637**, 138-146 (2006).
123. C. Sánchez Contreras, V. Bujarrabal, A. Castro-Carrizo, J. Alcolea y A. Sargent.
Interferometric CO J=2-1 Emission Mapping of the Protoplanetary Nebula IRAS 19475+3119.
Astrophysical Journal **643**, 945-955 (2006).
124. R. Sahai, K. Young, N. A. Patel, C. Sánchez Contreras y M. Morris.
A Massive Bipolar Outflow and a Dusty Torus with Large Grains in the Pre-Planetary Nebulae IRAS 22036+5306.
Astrophysical Journal **653**, 1241 (2006).

125. C. Prigent, J. R. Pardo y W. B. Rossow.
Comparisons of the Millimeter and Submillimeter Frequency Bands for Atmospheric Temperature and Water Vapour Soundings for Clear and Cloudy Skies.
Journal of Applied Meteorology **45**, 1622-1633 (2006).
126. J. R. Letelier y M. L. Senent.
A Simple Variational-Numerical Approach to the Ro-Vibrational Spectrum of Diatomic Molecules– An Application to CH⁺.
Spectrochimica Acta, Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy **65**, 1030-1034 (2006).
127. H. Massó, M. L. Senent, P. Rosmus et al.
Electronic Structure Calculations on the c-4 Cluster.
Journal of Chemical Physics **124**, 234304 (2006).
128. N. Mora-Díez, M. L. Senent y B. García.
Ab Initio Study of Solvent Effects on the Acetohydroxamic Acid Deprotonation Processes.
Chemical Physics **324**, 350-358 (2006).
129. I. Shnitko, J. Fulara, Q. Batalov, C. Gillery, H. Massó, P. Rosmus y J. P. Maier.
The Electronic Transition of Linear C₆H⁺ and C₈H⁺ in Neon Matrices.
Journal of Physical Chemistry A **110**, 2885-2889 (2006).
130. A. Labiano, C. P. O’Dea, P.D. Barthel, W. H. de Vries y S. A. Baum.
Star Formation in Hosts of Young Radio Galaxies.
New Astronomy Reviews **50**, 776-778 (2006).
131. R. Rigby, G. H. Rieke, J. L. Donley, A. Alonso-Herrero y P. G. Pérez-González.
Why X-Ray-Selected Active Galactic Nuclei Appear Optically Dull?
Astrophysical Journal **645**, 115-133 (2006).
132. P. Barmby, A. Alonso-Herrero, J. L. Donle, E. Egami, G. G. Fazio et al.
Mid-Infrared Properties of X-Ray Sources in the Extended Groth Strip.
Astrophysical Journal **642**, 126-139 (2006).
133. A. Alonso-Herrero, P. G. Pérez-González, D. M. Alexander, G. H. Rieke et al.
Infrared Power-Law Galaxies in the Chandra Deep Field-South: Active Galactic Nuclei and Ultraluminous Infrared Galaxies.
Astrophysical Journal **640**, 167-184 (2006).
134. A. I. Gómez de Castro, W. Wamsteker, M. Barstow, N. Brosch, N. Kappelman, W. Kollatchny, D. de Martino, I. Pagano, A. Lecavelier des Étangs, D. Ehrenreich, D. Reimers, R. G. Delgado, F. Najarro y J. Linsky.
Fundamental Problems in Astrophysics.
Astrophysics and Space Science **303**, 133-145 (2006).

6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

135. A. Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.
Conformational Features of Truncated HCV Core Protein in Virus-like Particles.
Biopolymers **82**, 334-338 (2006).
136. A. Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.
A New Accessory for the Study of H/D Isotopic Exchange and Biomolecular Interactions by Transmission Infrared Spectroscopy.
Analytical and Bioanalytical Chemistry **385**, 134-138 (2006).
137. P. Carmona, A. Rodríguez-Casado y M. Molina.
On the Role of Arginine-Carboxylate Pair in the ATP Hydrolysis.
Biophysical Chemistry **119**, 33-37 (2006).

138. A. Rodríguez-Casado, J. Bartolomé, V. Carreño, M. Molina y P. Carmona.
Structural Characterization of the 5'-Untranslated RNA of Hepatitis C Virus by Vibrational Spectroscopy.
Biophysical Chemistry **124**, 73-79 (2006).
139. S. Sánchez-Cortés, G. Corrado, O. E. Trubetskaya, O. A. Trubetskaya, B. Hermosín y C. Saiz-Jiménez.
Surface-Enhanced Raman Spectroscopy of Chernozem Humic Acid and Their Fractions Obtained by Coupling SEC-PAGE.
Applied Spectroscopy **60**, 40-53 (2006).
140. V. Cañamares, P. Sevilla, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos.
Surface-Enhanced Raman Scattering Study of the Interaction of Red Dye Alizarin and Ovalbumin.
Biopolymers **82**, 405-409 (2006).
141. V. Cañamares, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.
Degradation of Curcumin Dye in Aqueous Solution and on Ag Nanoparticles Studied by Ultraviolet-Visible Absorption and Surface-Enhanced Raman Spectroscopy.
Applied Spectroscopy **60**, 1386-1391 (2006).
142. I. Iriepa, A. I. Madrid, E. Gálvez y J. Bellanato.
Synthesis, Structural and Conformational Study of Some Amides Derived from N-Methylpiperazine.
Journal of Molecular Structure **787**, 8-13 (2006).
143. J. Gómez Rivas, M. Kuttge, P. Haring Bolivar, H. Kurz y J. A. Sánchez-Gil.
Low-Frequency Active Surface Plasmon Optics on Semiconductors.
Applied Physics Letters **88**, 082106 (2006).
144. J. A. Sánchez-Gil y J. Gómez Rivas.
Thermal Switching of the Scattering Coefficients of Terahertz Surface-Plasmon Polaritons Impinging on a Finite Array of Sub-Wavelength Grooves on Semiconductor Surfaces.
Physical Review B **73**, 205410 (2006).
145. J. Gómez Rivas, J. A. Sánchez-Gil, M. Kuttge, P. Haring Bolivar y H. Kurz.
Optically Switchable Mirrors for Surface Plasmon Polaritons Propagating on Semiconductor Surfaces.
Physical Review B **74**, 245324 (2006).
146. M. Santos, L. Díaz, M. Urbanova, D. Pokorná, Z. Bastl, J. Subrt y J. Pola.
IR Laser-Induced Process for Chemical Vapor Deposition of Polyselenocarbosilane Films.
Journal of Analytical and Applied Pyrolysis **76**, 178-185 (2006).
147. L. Díaz, M. Santos, J. A. Torresano, M. Castillejo, M. Jadraque, M. Martín, M. Oujja y E. Rebollar.
Infrared and Ultraviolet Laser Ablation Mechanisms of SiO.
Applied Physics A: Materials Science & Processing **85**, 33-37 (2006).

Publicaciones no recogidas en el SCI:

- D. Calvo-Dopico, M. Careche, A. Rodríguez-Casado y P. Carmona.
Calidad objetiva del pescado y métodos para su evaluación. Conexión con la calidad percibida por el consumidor.
Alimentación, Nutrición y Salud **13**, 74-80 (2006).
- J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.
Espectroscopía vibracional sobre nanoestructuras metálicas (SERS y SEIR): nuevos sustratos y aplicaciones.
Óptica Pura y Aplicada **39**, 125-128 (2006).

Publicaciones conjuntas con otros Dptos. detalladas anteriormente:

- C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, R. J. Davies y T. A. Ezquerro.

Templating of Crystallization and Shear-Induced Self-Assembly of Single-Wall Carbon Nanotubes in a Polymer-Nanocomposite.
Polymer **47**, 341-345 (2006).

M. V. Cañamares, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Surface-Enhanced Raman Scattering Study of the Adsorption of the Anthraquinone Pigment Carminic Acid Adsorption on Ag Nanoparticles.
Vibrational Spectroscopy **40**, 161-167 (2006).

P. Leyton, J. S. Gómez-Jeria, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo y M. Campos-Vallette.
Carbon Nanotube Bundles as Molecular Assemblies for the Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Surface-Enhanced Resonance Raman Spectroscopy (SERS) and Theoretical Studies.
Journal of Physical Chemistry B **110**, 6470-6474 (2006).

S. Martínez-Ramírez, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, M. T. Blanco-Varela y T. Blasco.
Evolution of Ordinary Portland Cement Hydration with Admixtures by Spectroscopic Techniques.
Advances in Cement Research **18**, 111-117 (2006).

Z. Jurasekova, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Surface-Enhanced Raman Scattering of Flavonoids.
Journal of Raman Spectroscopy **37**, 1239-1241 (2006).

L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.
Functionalization of Ag Nanoparticles with Dithiocarbamate Calix[4]arene as an Effective Supramolecular Host for the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.
Langmuir **22**, 10924-10926 (2006).

M. García-Heras, M. A. Villegas, J. M. A. Caen, C. Domingo y J. V. García-Ramos.
Patination of Historical Stained Window Lead Comes from Different European Locations.
Microchemical Journal **83**, 81-90 (2006).

6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

148. F. Ania, G. Broza, M. F. Mina, K. Schulte, Z. Roslaniec y F. J. Baltá Calleja.
Micromechanical Properties of Poly(Butylene Terephthalate) Nanocomposites with Single- and Multi-Walled Carbon Nanotubes.
Composite Interfaces **13**, 33-45 (2006).
149. R. K. Bayer, M. E. Cagliao y F. J. Baltá Calleja.
Structure Development in Amorphous Starch as Revealed by X-Ray Scattering: Influence of the Network Structure and Water Content.
Journal of Applied Polymer Science **99**, 1880-1886 (2006).
150. I. Puente Orench, F. J. Baltá Calleja, P. J. Hine y I. M. Ward.
A Microindentation Study of Polyethylene Composites Produced by Hot Compaction.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 1659-1663 (2006).
151. M. Rittner, P. Baeuerle, H. Schweizer, F. J. Baltá Calleja y M. H. Pilkuhn.
Oligothiophene Field Effect Transistors of DDnT and DPnT Type: Morphology, Performance in Vacuum and in Air.
Synthetic Metals **156**, 21-26 (2006).
152. R. K Bayer y F. J. Baltá Calleja.
Nanostructure Development in Wet Amorphous Amylopectin as Revealed by in Situ X-Ray Scattering Methods.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 3832-3839 (2006).

153. A. Ueberschaer, M. E. Cagiao, R. K. Bayer, S. Henning y F. J. Baltá Calleja.
Micromechanical Properties of Injection Molded Starch/Wood-Particle Composites.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 4893-4899 (2006).
154. R. Adhikari, W. Lebek, R. Godehardt, G. H. Michler, M. E. Cagiao, F. J. Baltá Calleja y K. Knoll.
Relationship between Nanostructure and Deformation Behaviour of Microphase-separated Styrene/Butadiene Systems.
Journal of Applied Polymer Science **101**, 998-1006 (2006).
155. A. Flores, V. B. F. Mathot, G. H. Michler, R. Adhikari y F. J. Baltá Calleja.
Novel Aspects of Microindentation Hardness in Very Low Crystallinity Ethylene-1-Octene Copolymers: A Model for Deformation.
Polymer **47**, 5602-5609 (2006).
156. M. Boyanova, F. J. Baltá Calleja y S. Fakirov.
New Aspects of the β - α Polymorphic Transition in Plastically Deformed Isotactic Polypropylene Studied by Microindentation Hardness.
Journal of Materials Science **41**, 5504-5509 (2006).
157. D. R. Rueda, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M. J. Capitán, T. A. Ezquerro, A. Labrador, E. Fraga, D. Beltrán, J. Juanhuix, J. F. Herranz y J. Bordas.
Versatile Wide Angle Diffraction Setup for Simultaneous Wide and Small Angle X-Ray Scattering Measurements with Synchrotron Radiation.
Review of Scientific Instruments **77**, 033904 (2006).
158. A. Gourrier, M. C. García Gutiérrez y C. Riekel.
Hardness Testing Under a Different Light: Combining Synchrotron X-Ray Microdiffraction and Indentation Techniques for Polymer Fiber Structure.
Philosophical Magazine **86**, 5753-5767 (2006).
159. M. Kastler, W. Pisula, F. Laquai, A. Kumar, R. J. Davies, S. Balushev, M. C. García-Gutiérrez, D. Wasserfallen, H. J. Butt, C. Riekel, G. Wegner y K. Müllen.
Organisation of Charge-Carrier Pathways for Organic Electronics.
Advanced Materials **18**, 2255-2259 (2006).
160. J. J. Hernández, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda y T. A. Ezquerro.
Small-Angle X-Ray Scattering of Single-Wall Carbon Nanotubes Dispersed in Molten Poly(Ethylene Terephthalate).
Composites Science and Technology **66**, 2629-2632 (2006).
161. W. Pisula, M. Kastler, D. Wasserfallen, R. J. Davies, M. C. García-Gutiérrez y K. Müllen.
From Macro- to Nanoscopic Templating with Nanographenes.
Journal of the American Chemical Society **128**, 14424-14425 (2006).
162. A. Sanz, A. Nogales, T. A. Ezquerro, N. Lotti, A. Munari y S. S. Funari.
Order and Segmental Mobility during Polymer Crystallization: Poly(Butylene Isophthalate).
Polymer **47**, 1281-1290 (2006).
163. M. G. Zolotukhin, M. C. G. Hernandez, A. M. Lopez, L. Fomina, G. Cedillo, A. Nogales, T. A. Ezquerro, D. R. Rueda, H. M. Colquhoun, K. M. Fromm, A. Ruiz-Trevino y M. Ree.
Film-Forming Polymers Containing in the Main-Chain Dibenzo Crown Ethers with Aliphatic (C_{10} - C_{16}), Aliphatic-Aromatic, or Oxyindole Spacers.
Macromolecules **39**, 4696-4703 (2006).
164. A. Nogales, A. Sanz, T. A. Ezquerro, R. Quintana y S. Muñoz-Guerra.
Molecular Dynamics of Poly(Butylene Tert-Butyl Isophthalate) and Its Copolymers with Poly(Butylene Terephthalate) as Revealed by Broadband Dielectric Spectroscopy.
Polymer **47**, 7078-7084 (2006).

165. A. Nogales, A. Sanz y T. A. Ezquerro.
On the Role of the β Process as Precursor of the α Relaxation in Aromatic Polyesters.
Journal of Non Crystalline Solids **352**, 4649-4655 (2006).
166. M. J. Cánovas, I. Sobrados, J. Sanz, J. L. Acosta y A. L. Linares.
Proton Mobility in Hydrated Sulfonated Polystyrene. NMR and Impedance Studies.
Journal of Membrane Science **280**, 461-469 (2006).
167. A. L. Linares, J. L. Acosta y S. Rodríguez.
Proton Conducting Blends Based on Polysulfones and Elastomers.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 3474-3482 (2006).
168. M. A. Barrera, J. F. Vega, M. Aguilar y J. Martínez-Salazar.
Melt Flow Index on High Molecular Weight Polyethylene: A Comparative Study of Experiments and Simulation.
Journal of Materials Processing Technology **174**, 171-177 (2006).
169. N. J. L. Van Ruth, J. F. Vega, S. Rastogi y J. Martínez-Salazar.
Viscoelastic Behaviour during the Crystallization of Isotactic Polypropylene.
Journal of Materials Science **41**, 3899-3905 (2006).
170. S. Rastogi, J. F. Vega, N. J. L. Van Ruth y A. E. Terry.
Non-Linear Changes in the Specific Volume of the Amorphous Phase of Poly(4-Methyl-1-Pentene); Kauzmann Curves, Inverse Melting, Fragility.
Polymer **47**, 5555-5565 (2006).
171. J. Peón, J. F. Vega, M. Aroca y J. Martínez-Salazar.
Rheological Behaviour of LDPE/EVAc Blends. II. Linear Viscoelasticity and Extrusion Properties.
Journal of Materials Science **41**, 4814-4822 (2006).
172. N. Haider, M. T. Expósito, A. Muñoz-Escalona, J. Ramos, J. F. Vega, L. Méndez y J. Martínez-Salazar.
Synthesis and Properties of Ethylene/Styrene Copolymers Produced by Metallocene Catalysts.
Journal of Applied Polymer Science **102**, 3420-3429 (2006).
173. M. Lobón-Poo, J. Osío Barcina, A. García Martínez, M. T. Expósito, J. F. Vega, J. Martínez-Salazar y M. L. Reyes.
Meso-[Norbornane-7,7-Bis(Indenyl)]Titanium Dichloride: A Highly Active Catalyst for Ethylene-Styrene Copolymerization.
Macromolecules **39**, 7479 -7482 (2006).
174. S. Martínez, J. Ramos, V. Cruz y J. Martínez-Salazar.
Effect of the $\text{Et}(\text{H}_4\text{Ind})_2\text{Zr}(\text{CH}_3)_2$ Catalyst on the Copolymerization of Ethylene and Styrene: A Computational Study.
Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry **44**, 4752-4761 (2006).
175. S. Martínez, J. Ramos, V. L. Cruz y J. Martínez-Salazar.
A QM/MM Study of the Ethylene and Styrene Insertion Process into the Ion Pair $[\text{Me}_2\text{Si}(\text{C}_3\text{Me}_4)(\text{N}^t\text{Bu})\text{Ti}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)]^+ [\mu\text{-Me-Al}(\text{Me})_2\text{-}(\text{AlOMe})_6\text{Me}]^-$.
Polymer **47**, 883-896 (2006).
176. D. Cardona, W. Quiñones, F. Torres, S. Robledo, I. D. Vélez, V. Cruz, R. Notario y F. Echeverri.
Leishmanicidal Activity of Withajardins and Acnistins. An Experimental and Computational Study.
Tetrahedron **62**, 6822-6829 (2006).
177. M. A. Ramos, I. M. Shmyt'ko, E. A. Arnautova, R. J. Jiménez-Riobóo, V. Rodríguez-Mora, S. Vieira y M. J. Capitán.
On the Phase Diagram of Polymorphic Ethanol: Thermodynamic and Structural Studies.
Journal of Non-Crystalline Solids **352**, 4769-4775 (2006).

178. M. J. Capitán, J. Álvarez, J. J. Calvente y R. Andreu.
Onset of Crystalline Order in 1-Nonanethiol Monolayers Deposited from Solution.
Angewandte Chemie-International Edition **45**, 6166-6169 (2006).

Publicaciones no recogidas en el SCI:

R. K. Bayer y F. J. Baltá Calleja.
Nanostructure of Potato Starch Part I: Early Stages of Retrogradation of Amorphous Starch in a Humid Atmosphere as Revealed by Simultaneous SAXS and WAXS.
International Journal of Polymeric Materials **55**, 773-788 (2006).

Publicaciones conjuntas con otros Dptos. detalladas anteriormente:

M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, R. J. Davies y T. A. Ezquerra.
Templating of Crystallization and Shear-Induced Self-Assembly of Single-Wall Carbon Nanotubes in a Polymer-Nanocomposite.
Polymer **47**, 341-345 (2006).

6.2 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS

6.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

1. J. Cortez y G. A. Mena Marugán.
Unitary Time Evolution in the Gowdy T3 Model.
Journal of Physics Conference Series **33**, 330-335 (2006).

6.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

2. S. Pittel, J. Dukelsky y N. Sandulescu.
The Density Matrix Renormalization Group and Nuclear Structure.
En "Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions".
AIP Conference Proceedings **831**, 225-229 (2006).
ISBN: 0-7354-0323-6.
3. J. Dukelsky, G. Ortiz y S. M. A. Rombouts.
Exact BCS Solution in the BCS-BEC Crossover.
En "Recent Progress in Many-Body Theories", 218-227 (World Scientific, Singapur, 2006).
ISBN: 981-256-957-X.
4. B. Errea, S. Lerma H., J. Dukelsky, S. Dimitrova, S. Pittel, P. Van Isacker y V. G. Gueorguiev.
Generalizations of the Richardson-Gaudin Models to Rank-2 Algebra.
En "25th International Workshop on Nuclear Theory", 236-244 (Diomira Publishers, Sofia, Bulgaria, 2006).
5. R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren y O. Moreno.
Isospin Mixing, Fermi Transitions and Signatures of Nuclear Deformation within a Mean Field Approach.
En "25th International Workshop on Nuclear Theory", 41-48 (Diomira Publishers, Sofia, Bulgaria, 2006).
6. C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.
Nucleon Resonances: Study of Their Properties through Photo Pion Production.
En "25th International Workshop on Nuclear Theory", 49-57 (Diomira Publishers, Sofia, Bulgaria, 2006).
7. A. N. Antonov, M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, J. A. Caballero, M. B. Barbaro, J. M. Udías y P. Sarriguren.
Superscaling Analyses of Inclusive Electron Scattering and Their Extension to Charge-Changing Neutrino Cross Sections in Nuclei.
En "25th International Workshop on Nuclear Theory", 59-72 (Diomira Publishers, Sofia, Bulgaria, 2006).

8. T. Lindenau, M. L. Ristig, J. W. Clark, J. Dawidowski y F. J. Bermejo.
The Physics of Liquid Para-Hydrogen.
En "Recent Progress in Many-Body Theories".
Series on Advances in Quantum Many-Body Theories Vol. 10, Cap. 3 (World Scientific, Singapur, 2006).
ISBN: 978-981-270-035-3.
9. A. S. Jensen, D. V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y E. Garrido.
Three-Body Decay of Nuclear Resonances.
En "Third Argonne/MSU Theory Workshop", 14-23 (World Scientific, Singapur, 2006).
ISBN 978-981-270-567-9.
10. F. J. Bermejo, J. W. Taylor, S. L. Mclain, I. Bustinduy, J. F. C. Turner, M. D. Ruiz-Martín, C. Cabrillo y R. Fernández-Perea.
Evidence of the Presence of Opticlike Collective Modes in a Liquid.
En "The ISIS Facility Annual Report 2006, Highlights of ISIS Science".
(<http://www.isis.rl.ac.uk/isis2006/pdf/REV06.PDF>).
11. F. Fernández-Alonso, F. J. Bermejo, I. Bustinduy, M. A. Adams y J. W. Taylor.
Magnetic and Molecular Excitations in Solid Oxygen.
En "The ISIS Facility Annual Report 2006, Highlights of ISIS Science".
(<http://www.isis.rl.ac.uk/isis2006/pdf/REV06.PDF>).

6.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

12. C. Domingo y G. Santoro.
Espectroscopía Raman de Nanotubos de Carbono.
En "Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas".
Eds. S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, O. Francioso y J. V. García-Ramos.
Comité de Espectroscopía (SEDO) (Madrid, 2006).
Depósito Legal M-24874-2006.
13. Informe técnico: *Frequency Converter Unit for CO₂- DIAL: State of the Art Raman Technology Review*.
Contribución del CSIC a la Technical Note 1 del "TRP ESA Project Pulsed Laser Source for LIDAR Applications".
14. Informe técnico: *Frequency converter unit for CO₂- DIAL: Raman Shifting Based Frequency Converter Unit Baseline Design Selection*.
Contribución del CSIC a la Technical Note 2 del TRP ESA Project "Pulsed Laser Source for LIDAR Applications".
15. S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, J. V. García-Ramos y C. Domingo.
Functionalization of Metal Nanoparticles with Synthetic and Natural Hosts for the Surface-Enhanced Spectroscopic Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.
En "Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas".
Eds. S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, O. Francioso y J. V. García-Ramos.
Comité de Espectroscopía (SEDO) (Madrid, 2006).
Depósito Legal M-24874-2006.
16. J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, P. Leyton y C. Domingo.
Detección de PAHs mediante espectroscopía SERS sobre superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos.
En "Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas".
Eds. S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, O. Francioso y J. V. García-Ramos.
Comité de Espectroscopía (SEDO) (Madrid, 2006).
Depósito Legal M-24874-2006.

6.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

17. F. Najarro.
Metallicity in the GC.

Journal of Physics: Conference Series **54**, 224-232 (2006).

18. P. Rosenkranz, S. Buelher, D. Feist, T. Hewison, N. Jacquinet-Husson, J. R. Pardo y R. Saunders.
Emission and Spectroscopy of the Clear Atmosphere.
Chapter 2 in “Thermal Microwave Radiation-Applications for Remote Sensing”.
Eds. C. Matzler, P. W. Rosenkranz, A. Battaglia y J. P. Wigneron.
IEE Electromagnetic Waves Series (Londres, Reino Unido).
ISBN: 0-86341-573-3 & 978-086341-573-9.
19. A. Battaglia, C. Simmer, S. Crewell, H. Czekala, C. Ende, F. Marzano, M. Mishchenki, J. R. Pardo y C. Prigent.
Emission and Scattering by Clouds and Precipitation.
Chapter 3 in “Thermal Microwave Radiation-Applications for Remote Sensing”.
Eds. C. Matzler, P. W. Rosenkranz, A. Battaglia y J. P. Wigneron.
IEE Electromagnetic Waves Series (Londres, Reino Unido).
ISBN: 0-86341-573-3 & 978-086341-573-9.
20. N. Feautrier, J. Cernicharo, F. Daniel, M. L. Subernet, F. Lique, M. L. Senent y A. Spieldiedel.
Molecules as a Diagnostic Tool in Astrophysics.
(En honor de P. Encrenaz)
Eds. F. Combes, F. Casoli, L. Falgarone y L. Pagani.

6.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

21. J.V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés y J.A. Sánchez-Gil.
Encyclopedia of Surface and Colloid Science.
En “Raman Spectroscopy of Colloidal Metal Surfaces: Surface Enhanced Raman Spectroscopy on Metal Hydrosols”, pp. 5373-5383 (Taylor & Francis, Nueva York, 2006).

Publicaciones conjuntas con otros Dptos. detalladas anteriormente:

S. Sánchez-Cortés, L. Guerrini, J. V. García-Ramos y C. Domingo.
Functionalization of Metal Nanoparticles with Synthetic and Natural Hosts for the Surface-Enhanced Spectroscopic Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.
En “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”.
Eds. S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, O. Francioso y J. V. García-Ramos.
Comité de Espectroscopía (SEDO) (Madrid, 2006).
Depósito Legal M-24874-2006.

J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, P. Leyton y C. Domingo.
Detección de PAHs mediante espectroscopía SERS sobre superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos.
En “Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas”.
Eds. S. Sánchez-Cortés, C. Domingo, O. Francioso y J. V. García-Ramos.
Comité de Espectroscopía (SEDO) (Madrid, 2006).
Depósito Legal M-24874-2006.

6.3 TESIS DOCTORALES

6.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Título: **Estudio de procesos débiles en núcleos mediante un formalismo de campo medio autoconsistente deformado con correlaciones RPA.**

Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 3 de febrero de 2006.

Calificación: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando: **Raquel Álvarez Rodríguez.**

Director: **Pedro Sarriguren Suquilbide y Elvira Moya de Guerra.**

Título: Producción electromagnética de mesones ligeros.
Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 2 de junio de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **César Fernández Ramírez.**
Director: **Elvira Moya de Guerra y José Manuel Udías Moineiro.**

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Título: Estudio teórico-experimental de compuestos halogenados adsorbidos en superficies de hielo similares a las nubes estratosféricas polares.
Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Jaén.
Fecha: junio de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **Ismael Kenneth Ortega Colomer.**
Director: **Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga.**

6.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Título: Química y física del medio interestelar en las regiones centrales de galaxias.
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 8 de septiembre de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **Sergio Martín.**
Director: **Jesús Martín-Pintado Martín y Rainer Mauersberger.**

6.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

Título: Aplicación de la Espectroscopía SERS al estudio de pigmentos de interés para el Patrimonio Histórico-Artístico.
Universidad: Complutense de Madrid.
Fecha: enero de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **María Vega Cañamares Arribas.**
Director: **José Vicente García Ramos y Santiago Sánchez Cortés.**

6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Título: Nanostructure and Surface Micromechanical Properties of Multilayered Polymer Materials.
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: 9 de junio de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **Inés Puente Orench.**
Director: **Francisco José Baltá Calleja y Fernando Ania García.**

Título: Síntesis y caracterización de copolímeros de etileno/estireno obtenidos con catalizadores de centro activo único.
Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 4 de septiembre de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **Teresa Expósito Espinosa.**
Director: **Javier Martínez-Salazar Bascañana y Javier Ramos Díaz.**

Título: Estudio computacional de la reacción de copolimerización de etileno y estireno activada por catalizadores organometálicos homogéneos.
Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 26 de mayo de 2006.
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.
Doctorando: **Sonia Martínez Hedo**.
Director: **Víctor Cruz Cañas y Javier Ramos Díaz**.

6.4 TESISAS DE LICENCIATURA Y DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS

6.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

Título: **High-Order Perturbations of a Spherical Spacetime. Theory and Algebraic Implementation.**
Universidad: Departamento de Física Teórica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: 6 de octubre 2006.
Calificación: Sobresaliente.
Diplomado: **David Brizuela Cieza**.
Director: **Guillermo Antonio Mena Marugán y José M. Martín García**.

Título: **Cuantización de ondas de Einstein-Rosen acopladas con materia.**
Universidad: Departamento de Física Teórica, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: 6 de octubre 2006.
Calificación: Sobresaliente.
Diplomado: **Iñaki Garay Elizondo**.
Director: **Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor y Jesús Fernando Barbero González**.

6.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

Título: **Study of Excited States of ^{12}C in Full Kinematics.**
Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad de Huelva.
Fecha: 22 de diciembre de 2006.
Calificación: Sobresaliente.
Tesisando: **Martín Alcorta Moreno**.
Director: **Olof E. I. Tengblad**.

Título: **Campo medio deformado y correlaciones RPA aplicados a procesos débiles en isótopos exóticos de la región del plomo.**
Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 4 de septiembre de 2006.
Calificación: Apto.
Tesisando: **Óscar Moreno Díaz**.
Director: **Pedro Sarriguren Suquibide y Elvira Moya de Guerra**.

6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

Título: **Sistemas de interés atmosférico. Estudio teórico y predicción de espectros de absorción infrarroja.**
Universidad: Dpto. de Física de la materia condensada, Universidad Autónoma de Madrid.
Tesisando: **Beatriz Martín Llorente**.
Director: **Rafael Escribano Torres**.

Título: **Descargas DC de H₂ a baja presión**
Universidad: Dpto. de Física Aplicada, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: 19 de septiembre de 2006.
Tesisando: **Isabel Méndez Sánchez**.
Director: **Isabel Tanarro Onrubia y Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga**.

6.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

Tesis: **La química del oxígeno en la envoltura circunestelar de la estrella AGB rica en carbono IRC +10216.**
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha: marzo de 2006.

Tesinando: **Marcelino Agúndez Chico.**

Director: **José Cernicharo Quintanilla.**

CAPÍTULO 7
TABLAS Y DATOS

7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO

	Previsión 2005	2005	Previsión 2006	2006
Número de artículos en revistas SCI	135	140	140	178
Número de artículos en revistas NO SCI	13	18	13	20
Stock total de becas/contratos pre-doctorales	23	32	24	39
Stock total de becas/contratos post-doctorales	13	15	14	18
Total de tesis doctorales leídas	4	4	5	8
Total de créditos de cursos de doctorado/postgrado	20	20	22	27,5

7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS SCI

REVISTA	NÚMERO DE PUBLICACIONES	ÍNDICE DE IMPACTO (en 2005)
Astrophysical Journal Supplement Series	2	14,428
Angewandte Chemie-International Edition	1	9,596
Advanced Materials	1	9,107
Physical Review Letters	5	7,489
Astrophysical Journal	25	6,308
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	1	5,352
Physics Letters B	2	5,301
Physical Review D	8	4,852
Astronomy & Astrophysics	11	4,223
Applied Physics Letters	1	4,127
Journal of Physical Chemistry B	3	4,033
Macromolecules	2	4,024
Inorganic Chemistry	1	3,851
Journal of Computational Chemistry	1	3,786
Langmuir	1	3,705
Physical Review C	8	3,610
Physical Review B	11	3,185
Journal of Chemical Physics	2	3,138
Journal of Polymer Science Part A. Polymer Chemistry	1	3,027
Progress in Particle and Nuclear Physics	2	2,991
Classical & Quantum Gravity	2	2,938
Journal of Physical Chemistry A	6	2,898
Polymer	6	2,849

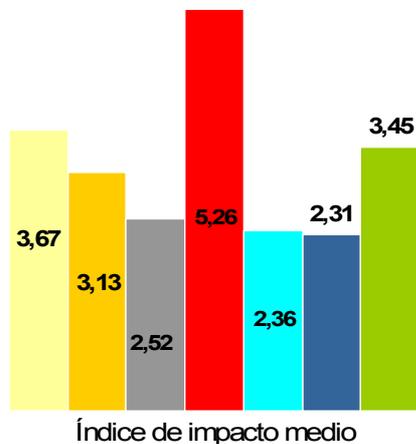
Journal of Geophysical Research	1	2,784
Analytical and Bioanalytical Chemistry	1	2,695
Journal of Membrane Science	1	2,654
Tetrahedron	1	2,610
Annals of Physics (NY)	1	2,596
Biopolymers	2	2,545
Geophysical Research Letters	1	2,491
Chemical Physics Letters	2	2,438
Composites Science and Technology	1	2,184
Journal of Physics. Condensed Matter	5	2,145
Applied Physics A. Materials Science & Processing	1	1,990
Nuclear Physics A	1	1,950
Chemical Physics	2	1,934
Biophysical Chemistry	2	1,925
Journal of Raman Spectroscopy	4	1,884
Applied Spectroscopy	2	1,868
Microchemical Journal	1	1,806
Vibrational Spectroscopy	1	1,758
European Physical Journal B	1	1,720
Journal of Applied Meteorology	1	1,702
European Physical Journal A	1	1,659
Journal of Physics A. Mathematical and General	1	1,566
Philosophical Magazine	1	1,470
New Astronomy Reviews	1	1,463
Journal of Molecular Structure	2	1,440
Journal of the American Chemical Society	1	1,435
International Journal of Modern Physics E. Nuclear Physics	3	1,380
Molecular Physics	3	1,351
Synthetic Metals	1	1,320
Spectrochimica Acta Part A. Molecular and Biomolecular Spectroscopy	1	1,290
Journal of Analytical and Applied Pyrolysis	1	1,265
Journal of Noncrystalline Solids	2	1,264
Physica Scripta	3	1,240
Review of Scientific Instruments	1	1,235
Journal of Applied Polymer Science	7	1,072
Composite Interfaces	1	0,929
Journal of Materials Science	3	0,901
Physica B. Condensed Matter	3	0,796
Journal of Materials Processing Technology	1	0,592
Advances in Cement Research	1	0,500
Astrophysics and Space Science	3	0,495
International Journal of Modern Physics B	2	0,381
TOTAL:	178	Índice de impacto medio: 3,453

Número de revistas: 66

7.3 ÍNDICE DE IMPACTO MEDIO DE LAS PUBLICACIONES SCI POR DPTOS.

Clave de Dptos:

Química y Física Teóricas: _____ **QFT**
 Física Nuclear y Física Estadística: ____ **FNFE**
 Física Molecular: _____ **FM**
 Astrofísica Molecular e Infrarroja: ____ **DAMIR**
 Espectroscopía Vibracional y
 Procesos Multifotónicos: _____ **EVPM**
 Física Macromolecular: _____ **FMM**



■ QFT	3,67
■ FNFE	3,13
■ FM	2,52
■ DAMIR	5,26
■ EVPM	2,36
■ FMM	2,31
■ IEM	3,45

7.4 PERSONAL DE LOS DPTOS.

DPTO.	Científicos en Plantilla		“Ramón y Cajal”		Otros PostDocs		Drs. Vinculados		Resto de Personal Científico ¹		Personal de Apoyo		Personal Total		
	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	TOTAL
QFT	3	-	-	-	3	-	2	-	4	-	-	-	12	-	12
FNFE	6	1	1	-	2	1	2	1	10	4	-	1	21	8	29
FM	9	3	-	-	3	-	-	-	2	4	3	1	17	8	25
DAMIR	5	1	1	2	-	-	1	1	9	8	1	1	17	13	30
EVPM	5	1	-	-	1	2	1	2	2	2	-	3	9	10	19
FMM	6	4	-	2	-	-	1	-	2	3	1	1	10	10	20
Admon.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5	-	5	5
IEM	34	10	2	4	9	3	7	4	29	21	5	12	86	54	140

¹ Sin incluir “Autorizaciones de permanencia”
 (Ver la “Clave de Dptos.” en el apartado 7.3)

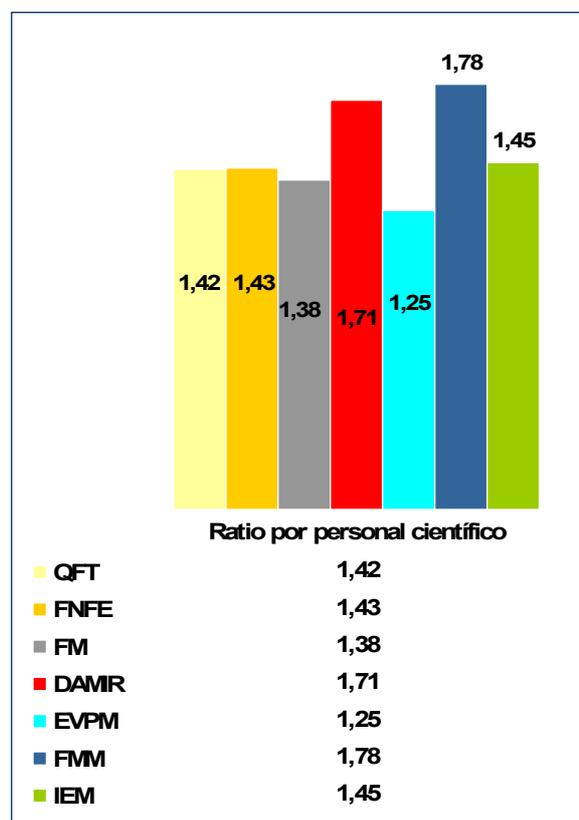
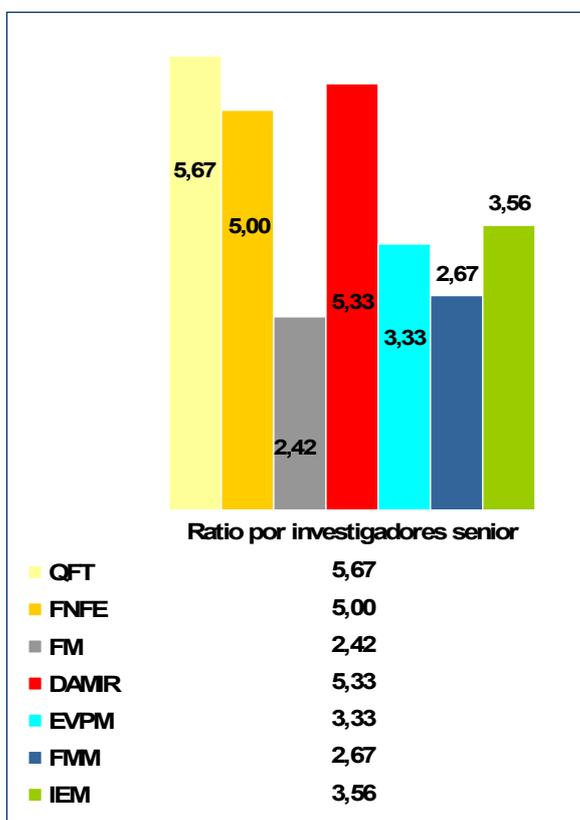
Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados: 129

7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DPTOS.

	QFT	FNFE	FM	DAMIR	EVPM	FMM
Publicaciones en revistas SCI	17	40	29	48	20	32
Otras publicaciones y monografías	1	10	5	4	5	1

7.6 RATIO DE PUBLICACIONES SCI POR DPTOS.

- **Ratio por investigadores “senior”** (en plantilla más Drs. “Ramón y Cajal”).
- **Ratio por personal científico** (personal total excepto el de apoyo).



(Ver la “Clave de Dptos.” en el apartado 7.3)

Ratio de publicaciones SCI del IEM por personal científico en plantilla: 4,05

ÍNDICE

Introducción	1
1. Estructura del Instituto	3
Dirección	5
Junta de Instituto	5
Claustro Científico	5
Departamentos de investigación	6
Dpto. de Química y Física Teóricas	6
Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	6
Dpto. de Física Molecular	7
Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	8
Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	8
Dpto. de Física Macromolecular	9
Unidad de Gestión Económica-Administrativa	9
Servicios del Centro de Física Miguel Antonio Catalán	10
2. Labor investigadora.....	11
2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	13
2.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	16
2.3 Dpto. de Física Molecular.....	23
2.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	27
2.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	33
2.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	39
3. Proyectos de investigación.....	47
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	49
3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	49
3.3 Dpto. de Física Molecular.....	51
3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	53
3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	56
3.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	58
4. Cooperación científica	63
4.1 Congresos y reuniones nacionales	65
4.1.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	65
4.1.3 Dpto. de Física Molecular.....	65
4.1.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	65
4.1.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	66
4.1.6 Dpto. de Física Macromolecular	66
4.2 Congresos y reuniones internacionales	67
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	67
4.2.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	68
4.2.3 Dpto. de Física Molecular.....	70
4.2.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	72
4.2.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	74
4.2.6 Dpto. de Física Macromolecular	76
4.3 Estancias de investigadores en el Instituto	77
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	77
4.3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	78
4.3.3 Dpto. de Física Molecular.....	78
4.3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	78
4.3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	79
4.3.6 Dpto. de Física Macromolecular	79
4.4 Conferencias de investigadores invitados	79
4.4.1 Dpto. de Química y Física Teóricas	79

4.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	81
4.4.3	Dpto. de Física Molecular	81
4.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	82
4.4.6	Dpto. de Física Macromolecular	82
4.5	Visitas de investigadores a centros internacionales (1 semana o más).....	83
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	83
4.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	83
4.5.3	Dpto. de Física Molecular	84
4.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	85
4.5.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	86
4.5.6	Dpto. de Física Macromolecular	86
5.	Labor docente, difusión de la ciencia y otras actividades	89
5.1	Asignaturas de doctorado impartidas por investigadores del Instituto.....	91
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	91
5.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	91
5.1.3	Dpto. de Física Molecular	91
5.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	91
5.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	91
5.2	Cursos y conferencias impartidos por investigadores del Instituto	91
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	91
5.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	92
5.2.3	Dpto. de Física Molecular	92
5.2.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	93
5.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	93
5.2.6	Dpto. de Física Macromolecular	94
5.3	Cursos, congresos y seminarios organizados por el Instituto	95
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	95
5.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	95
5.3.3	Dpto. de Física Molecular	96
5.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	96
5.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	97
5.3.6	Dpto. de Física Macromolecular	97
5.4	Premios y otros méritos	98
5.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	98
5.4.3	Dpto. de Física Molecular	98
5.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	99
5.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	99
5.4.6	Dpto. de Física Macromolecular	99
5.5	Transferencia de tecnología	99
5.5.6	Dpto. de Física Macromolecular	99
6.	Publicaciones y producción científica	103
6.1	Trabajos publicados en revistas	105
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	105
6.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	106
6.1.3	Dpto. de Física Molecular	109
6.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	111
6.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	114
6.1.6	Dpto. de Física Macromolecular	116
6.2	Libros, monografías y publicaciones de <i>proceedings</i>	119
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	119
6.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	119
6.2.3	Dpto. de Física Molecular	120
6.2.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	120
6.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	121

6.3	Tesis doctorales	121
6.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	121
6.3.3	Dpto. de Física Molecular	122
6.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	122
6.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos	122
6.3.6	Dpto. de Física Macromolecular	122
6.4	Tesinas de Licenciatura y Diploma de Estudios Avanzados.....	123
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas	123
6.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística	123
6.4.3	Dpto. de Física Molecular	123
6.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja	123
7.	Tablas y datos	125
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico.....	127
7.2	Resumen de publicaciones en revistas SCI.....	127
7.3	Índice de impacto medio de las publicaciones SCI por Dptos.	129
7.4	Personal de los Dptos.	129
7.5	Número de publicaciones por Dptos.	130
7.6	Ratio de publicaciones SCI por Dptos.	130