

**MEMORIA**

**DE LA LABOR REALIZADA  
DURANTE EL**

**AÑO 2007**

**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 sólidamente asentado en el CSIC y de gran visibilidad no sólo en él, sino también en España, en Europa y en la comunidad internacional. 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 siete 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 10 doctores vinculados, 15 investigadores postdoctorales, 3 investigadores en estancia sabática, 40 becarios predoctorales y 12 titulados contratados. El personal de apoyo se compone de 19 miembros, distribuidos entre los seis Departamentos citados anteriormente y la Unidad de Gestión Económica-Administrativa. En total, el personal del IEM asciende a 136 personas, sin incluir los doctores vinculados.

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 2007 ha quedado plasmada en 181 publicaciones en revistas ISI. A esto hay que añadir la consecución de diez tesis doctorales y la dirección de ocho diplomaturas de estudios avanzados y una tesis de máster.



**CAPÍTULO 1**  
**ESTRUCTURA DEL INSTITUTO**



## **DIRECCIÓN**

**Director:** Prof. José Vicente García Ramos  
**Vicedirector:** Dr. Guillermo A. Mena Marugán  
**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  
Dr. Tiberio A. Ezquerro Sanz  
Dr. José M<sup>a</sup> Fernández Sánchez  
Prof. María José García Borge  
Dr. Eduardo Garrido Bellido  
Dr. José González Carmona  
Dr. Guillermo A. Mena Marugán  
D. Miguel Ángel Moreno Alba  
Dr. Francisco Najarro de la Parra  
Dr. José Antonio Sánchez Gil

## **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. María Esperanza Cagiao Escotado  
Dra. María 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  
Dr. Ricardo Fernández Perea  
Dr. José M. Fernández Sánchez  
Dra. Araceli Flores Aguilar Amat  
Prof. María José García Borge  
Dr. José González Carmona  
Dr. Víctor Herrero Ruiz de Loizaga  
Dra. Amelia Linares Dos Santos  
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana  
Prof. Jesús Martín-Pintado Martín  
Dra. Belén Maté Naya  
Dr. Guillermo A. Mena Marugán

Prof. Salvador Montero Martín  
Dr. Francisco Najarro de la Parra  
Dra. Aurora Nogales Ruiz  
Dr. Juan Ortigoso Martínez  
Dr. Juan Ramón Pardo Carrión  
Dr. Daniel Reyes Rueda Bravo  
Dra. Carmen Sánchez Contreras  
Dr. Santiago Sánchez Cortés  
Dr. José Antonio Sánchez Gil  
Dr. Julio Francisco Santos Gómez  
Dra. Magna Santos Greve  
Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide  
Dra. María Luisa Senent 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. Guillermo Antonio Mena Marugán	Investigador Científico
Dr. Jesús Fernando Barbero González	Científico Titular
Dr. José María Martín García	Investigador Contratado I3P
Dr. Tomasz Henryk Pawlowski	Investigador Contratado I3P desde 09/2007
Dr. Luis Garay Elizondo	Doctor Vinculado
Dr. Eduardo Jesús Sánchez Villaseñor	Doctor Vinculado
D. David Brizuela Cieza	Becario Predoctoral FPI de CAM
D. Iñaki Garay Elizondo	Becario Predoctoral FPU
D. Daniel Gómez Vergel	Becario Predoctoral I3P
Dña. Mercedes Martín Benito	Becario Predoctoral I3P
D. Pablo Galán Sánchez	Contratado Postgrado I3P

### **DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

**Jefe del Departamento:**

Profa. María José García Borge

Profesora de Investigación

**Personal Científico:**

Nombre y Apellidos:

Escala o Categoría:

Prof. Francisco Javier Bermejo Barrera	Profesor de Investigación
Prof. Jorge Dukelsky Bercovich	Profesor de Investigación
Dr. Eduardo Garrido Bellido	Investigador Científico
Dr. Pedro Sarriguren Suquilbide	Investigador Científico
Dr. Olof Erik I. Tengblad	Investigador Científico
Dr. Carlos Cabrillo García	Científico Titular
Dr. Ricardo Fernández Perea	Científico Titular
Dr. Daniel Galaviz Redondo	Investigador Contratado “Juan de la Cierva”
Dr. Rafael Alejandro Molina Fernández	Investigador Contratado I3P
Dr. Armando Relano Pérez	Investigador Contratado “Juan de la Cierva”
Dra. Manuela Turrión Nieves	Investigador Contratado I3P

Dr. Carlos Esebbach Benchimol  
Dr. Luis Mario Fraile Prieto  
Profa. Elvira Moya Valgañón (E. Moya de Guerra)  
Dra. Aránzazu Maira Vidal  
Dr. Rayner Roberto Rodriguez Guzman  
D. Jérôme Souin  
D. Martín Alcorta Moreno  
D. Francisco Clemente Guitierrez  
D. Mario Alberto Cubero Campos

D. Raúl de Diego Martínez  
D. Ricardo Domínguez Reyes  
Dña. Beatriz Errea Subero  
D. César Fernández Ramírez  
D. Miguel Madurga Flores  
D. Óscar Moreno Díaz  
Dña. Carolina Romero Redondo  
Dr. Mítko Konstantinov Gaidarov  
Dr. Ibón Bustinduy Uriarte

D. Diego Escrig Forano

#### **Personal de apoyo:**

Dña. Purificación Corchete Corchete  
D. Ángel Perea Martínez

Doctor Vinculado  
Doctor Vinculado  
Doctor Vinculado  
Contratado TSIL  
Titulado Superior Contratado ATP  
Titulado Superior Contratado ATP  
Becario Predoctoral I3P  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral  
Conv. CSIC-Univ.Costa Rica  
Becario Predoctoral I3P  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral FPI de CAM  
Becario Predoctoral UA  
Becario Predoctoral FPU  
Becario Predoctoral FPU  
Becario Predoctoral I3P  
Prof. Sabático MEC  
Autorizado Permanencia  
(Investigador Contratado Univ.País Vasco)  
Autorizado Permanencia

Ayudante I+D+I  
Técnico Especialista de Grado Medio OPI's

### **DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

#### **Jefe del Departamento:**

Dr. José María Fernández Sánchez

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  
Dra. Belén Maté Naya  
Dr. Juan Ortigoso Martínez  
Dr Julio Francisco Santos Gómez  
Dr. Guzmán Tejeda Gala  
Dr. Óscar Gálvez González  
Dr. Raúl Zósimo Martínez Torres  
Dr. Ángel Ramos Gallardo  
Dña. Judith Durá Díez  
Dña. Laura Gómez Martín  
D. Juan Hernández Morilla  
Dña. Beatriz Martín Llorente  
Dña. Isabel Méndez Sánchez  
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 "Juan de la Cierva"  
Investigador Contratado I3P  
Investigador Contratado I3P  
Becario Predoctoral UA  
Becario Predoctoral (hasta 06/2007)  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral CAM  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral CSIC-PIF (hasta 06/2007)

#### **Personal de apoyo:**

D. José Manuel Castillo de Pedro  
Dña. María José Malagón Sisto

Técnico Especialista de Grado Medio OPI's  
Ayudante de Investigación (desde 08/2007)

D. Miguel Ángel Moreno Alba  
D. José Luis Martínez Sanmartín  
Dña. Amelia Velo Gómez

Ayudante de Investigación  
Contratado I3P (hasta 06/2007)  
Contratado I3P (hasta 06/2007)

## **DPTO. 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 Mocoeroa  
Dr. Luis Colina Robledo  
Dra. María Luisa Senent Díez  
Dr. Francisco Najarro de la Parra  
Dr. Juan Ramón Pardo Carrión  
Dra. Carmen Sánchez Contreras  
Dra. Almudena Alonso Herrero  
Dra Rosa Domínguez Gómez  
Dr. Arturo Rodríguez Franco  
Dr. Fabien Daniel  
Dr. Fabrice Dayou  
D. José Pablo Fonfría Expósito  
Dr. Alejandro García Bedregal  
Dr. David Hurtado Bouza  
Dr. Álvaro Labiano Ortega  
Dra. Nuria Marcelino Lluch  
Dr. Eduardo Sánchez Suárez  
Dr. Michael Taylor  
D. Marcelino Agúndez Chico  
Dña. Julia Alfonso Garzón  
Dña. M<sup>a</sup> Aranzazu Amo Baladrón  
D. Tanio Díaz Santos  
Dña. Macarena García Marín  
D. Daniel Miralles Caballero  
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  
Investigador Científico  
Investigador Científico  
Científico Titular  
Científico Titular (desde 06/2007)  
Científico Titular (desde 06/2007)  
Investigador Contratado “Ramón y Cajal”  
Doctor Vinculado  
Doctor Vinculado  
Titulado Superior Contratado TSAT  
Becario Predoctoral FPU  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral I3P  
Becario Predoctoral FPI  
Becario Predoctoral FP6 “MARIE CURIE”

### **Personal de apoyo:**

Dr. Marcelo Castellanos Beltrán  
Dña. Alicia Fernández Clavero

Gestor Proyecto Astrocam de CAM  
Ayudante de Investigación

## **DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

### **Jefe del Departamento:**

Dr. José Antonio Sánchez Gil

Científico Titular

### **Personal Científico:**

#### Nombre y Apellidos:

Prof. Juana Bellanato Fontecha  
Prof. José Vicente García Ramos  
Dr. Pedro Carmona Hernández

#### Escala o Categoría:

Prof. Investigación (Vinculado ad honorem)  
Profesor de Investigación  
Investigador Científico

Dr. Luis Díaz Sol  
Dr. Santiago Sánchez Cortés  
Dra. Magna Santos Greve  
Dra. M<sup>a</sup> Rosa López Ramírez  
Dra. M<sup>a</sup> Aránzazu Rodríguez Casado  
Dra. Marina Molina Santos  
D. Vincenzo Giannini  
D. Luca Guerrini  
Dña. Zuzana Jurasekova

D. Rogelio Rodríguez Oliveros  
Dr. Gabriel Martínez Niconoff

#### **Personal de apoyo:**

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

Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular  
Investigador Contratado I3P  
Investigador Contratado I3P (hasta 03/2007)  
Doctor Vinculado  
Becario Predoctoral CAM (hasta 10/2007)  
Becario Predoctoral I3P  
Contratado Predoctoral Marie Curie  
“Early Stage Training”  
Becario Predoctoral FPI (desde 07/2007)  
Estancia Sabática (hasta 06/2007)

Auxiliar Administrativo  
Ayudante de Investigación  
Contratado I3P

### **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 Bascañana  
Dr. Daniel R. Rueda Bravo  
Dr. Fernando Ania García  
Dra. María Esperanza Cagiao Escotado  
Dra. María José Capitán Aranda  
Dr. Víctor Cruz Cañas  
Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat  
Dra. Amelia Linares Dos Santos  
Dra. Aurora Nogales Ruiz  
Dra. M<sup>a</sup> Cruz García Gutiérrez  
Dr. Juan Francisco Vega Borrego  
Dr. Francisco Javier Ramos Díaz  
Dra. M<sup>a</sup> Teresa Expósito Espinosa  
D. Jaime Javier Hernández Rueda  
D. Jon Otegui de la Fuente  
Dña. Nuria Robledo Álvaro  
Dr. Marco Pieruccini

##### Escala o Categoría:

Prof. Investigación (Vinculado ad honorem)  
Profesor de Investigación  
Investigador Científico  
Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular  
Científico Titular (desde 06/2007, antes RyC)  
Investigador Contratado “Ramón y Cajal”  
Investigador Contratado “Ramón y Cajal” (desde 11/2007)  
Investigador Contratado I3P  
Becario Predoctoral FPI (hasta 04/2007)  
Becario Predoctoral FPI  
Contratado Postgrado I3P  
Contratado Postgrado I3P  
Estancia Sabática (desde 10/2007)

#### **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<sup>a</sup> Teresa Burriel Barceló  
Dña. Ana María García Arribas  
Dña. M<sup>a</sup> Carmen García Collado  
Dña. Isabel Lombán Botello  
Dña. Concepción Nieto Serrano

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

# **SERVICIOS DEL CENTRO DE FÍSICA MIGUEL ANTONIO CATALÁN**

## **ALMACÉN**

Dña. María Jesús Puado Villalba  
Dña. María Luisa Virtud Jiménez

Ayudante de Investigación OPI's  
Ayudante de Laboratorio

## **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. Administrativo de Organismos Autónomos  
Administrativo

## **CENTRALITA**

Dña. Encarnación García-Alcañiz Fernández  
Dña. María Paz Sánchez-Beato Dorado

Auxiliar Servicios Generales  
Auxiliar Servicios Generales

## **CONSERJERÍA**

D. Eduardo Balbas Utrillas  
Dña. Soledad Moreno Zambrano

Ayudante Gestión y Servicios Comunes  
Ayudante Gestión y Servicios Comunes

## **INFORMÁTICA**

D. Jorge Álvarez Copo  
D. Carlos Meneses Jiménez

I3P (Técnico Medio Área Téc. Mant.)  
Titulado Técnico de OPI's

## **MANTENIMIENTO**

Dña. Belén Palero Fernández  
D. David Fernández Rioja  
D. José María Sanz Pastor

Ayudante de Investigación OPI's  
I3P (Técnico Activ. Téc. Mant. GP4)  
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. Luis Ángel de Prado Serrano

Técnico Especialista de Grado Medio OOPP  
(hasta 06/2007)  
Ayudante de Investigación

## **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.
- Gravedad y Cosmología Cuántica de Lazos.
- 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.

### LABOR INVESTIGADORA

#### **- Gravitación: cosmología cuántica, escalas invariantes y análogos de agujeros negros.**

Durante el año 2007 se ha continuado desarrollando líneas ya tradicionales del Grupo de Física Gravitacional como son la cuantización de modelos cosmológicos de Relatividad General con infinitos grados de libertad correspondientes a inhomogeneidades, el estudio de la emergencia de escalas invariantes en Gravedad Cuántica y de sus posibles consecuencias para la existencia de límites de resolución espaciotemporal, o el estudio de análogos de agujeros negros en Física de la Materia Condensada.

En lo referente a cuantización de modelos cosmológicos obtenidos en Relatividad General por la imposición de simetrías, hemos estudiado en detalle el caso de las cosmologías de Gowdy con la topología de un tres-toro y con ondas gravitatorias linealmente polarizadas. Éste es un modelo arquetípico de soluciones cosmológicas con secciones espaciales compactas y que contienen grados de libertad locales correspondientes a las inhomogeneidades asociadas a ondas gravitatorias. Dichas cosmologías describen universos en expansión que, de forma genérica, comienzan en una singularidad inicial de tipo “big-bang”. En trabajos anteriores, habíamos demostrado que es posible alcanzar una teoría cuántica consistente para describir este modelo cosmológico a partir de técnicas propias de Teoría Cuántica de Campos en espacios curvos. Esta consistencia incluye la implementación de la dinámica del sistema (una vez fijado el gauge temporal convenientemente) mediante una transformación cuántica unitaria, compatible con la interpretación probabilística convencional de la Mecánica Cuántica. En dicha teoría cuántica, se adopta una representación de Fock para el campo escalar que contiene los grados de libertad locales asociados a las ondas gravitatorias. Esta cuantización es la primera descripción cuántica satisfactoria en la literatura de un modelo cosmológico con inhomogeneidades. Estos resultados se han complementado con la construcción de la representación de Schrödinger para el sistema. Hemos demostrado que esta descripción funcional es equivalente a la de Fock y mostrado cómo la evolución viene dada por una transformación unitaria en este contexto.

Asimismo, hemos completado estudios anteriores encaminados a probar que la teoría cuántica construida es la única físicamente aceptable. Hemos conseguido demostrar que, si se exige que la evolución del sistema y una simetría homogénea remanente en el mismo (que es la única simetría gauge del modelo) sean implementadas en la teoría cuántica como transformaciones unitarias, tanto la elección de campo fundamental para describir los grados de libertad locales de estas cosmologías como la cuantización de Fock que se adopta para ese campo son en realidad las únicas posibles, salvo por equivalencias unitarias que no alteran los resultados físicos. Este resultado es realmente llamativo, y proporciona una enorme solidez a las conclusiones derivadas de la cuantización del sistema. Es más, no existen precedentes en la literatura de teoremas de unicidad de este tipo para Teoría de Campos en espacios curvos con dependencia temporal.

Aún más, prosiguiendo con el estudio de estas cosmologías de Gowdy, hemos conseguido extender la cuantización al sistema sin fijación completa del gauge temporal y reemplazando las técnicas de cuantización de Teoría de Campos por las de Gravedad de Lazos. Para los estados físicos, esta cuantización conduce a la descripción ya construida de los grados de libertad inhomogéneos en términos de una representación de Fock, pero modifica el tratamiento de la evolución del sistema (ya que la variable de tiempo interno no se identifica ahora con una coordenada). De esta forma, la singularidad cosmológica inicial resulta ser evitada en la teoría cuántica, como se había comprobado ya que sucede para modelos de universos homogéneos en Cosmología Cuántica de Lazos.

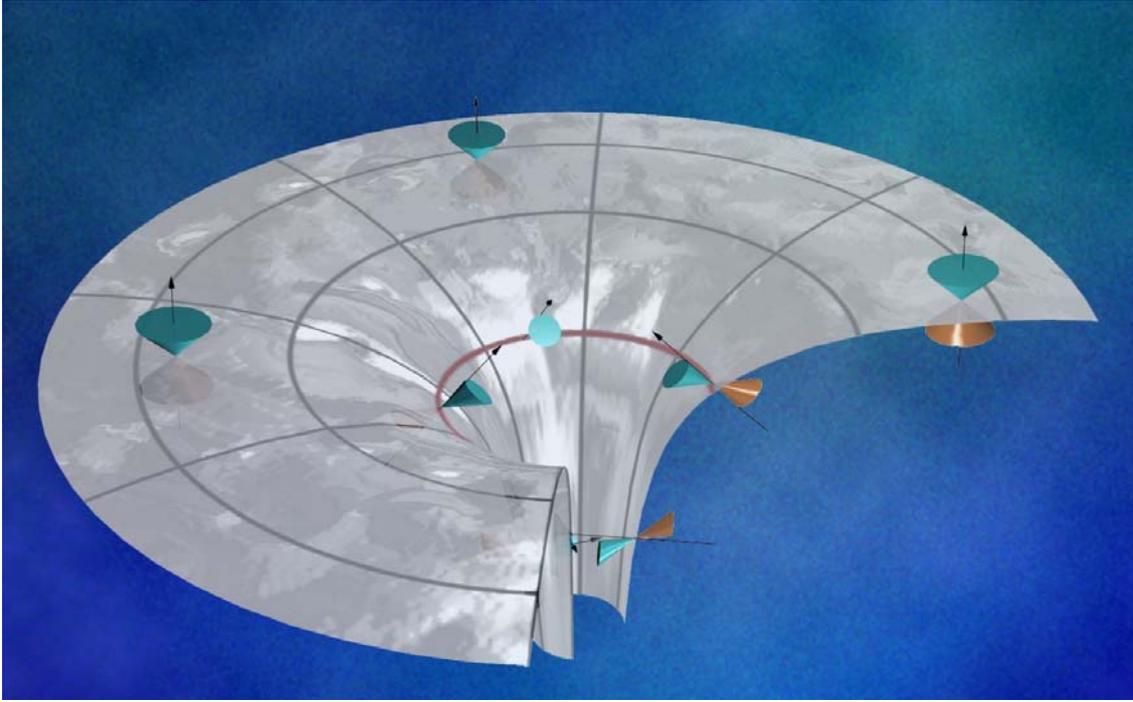
Por último y dentro del contexto de las reducciones de simetría se ha comenzado a explorar los aspectos clásicos y cuánticos asociados con las otras topologías posibles para modelos de Gowdy compactos: el producto de la esfera bidimensional por el círculo y la tres-esfera. Éste es un problema interesante porque permite explorar en un modelo exactamente resoluble cuál es la influencia de la topología tanto sobre aspectos físicos (asociados con la presencia de singularidades iniciales y finales) como matemáticos. En lo referente a este último aspecto es destacable el hecho de que la estructura de las ligaduras presentes en el modelo obtenido tras una deparametrización (similar a la empleada para el caso del tres-toro) es distinta a la habitual. Esto es debido en primer lugar a la aparición de las llamadas ligaduras polares, que tienen su origen en las condiciones de regularidad que es necesario imponer para tener en cuenta la presencia de puntos fijos (centros de rotación) de las transformaciones de simetría generadas por los campos de Killing. Por otra parte, cuando se fija el gauge no queda ninguna simetría residual (al contrario de lo que sucede en el caso del tres-toro) por lo que la formulación final del modelo resultante como sistema dependiente del tiempo es, en cierto sentido, más sencilla que las encontradas para las topologías estudiadas anteriormente. Un último comentario referente a este punto es el hecho de que todo el estudio se ha realizado para modelos de Gowdy acoplados a campos escalares sin masa utilizando las ideas que fueron introducidas con éxito para el acoplo de materia con ondas de Einstein-Rosen. Durante el año 2007 se completó también la cuantización de estos modelos. En particular se han identificado --y resuelto-- los problemas asociados con la dinámica cuántica utilizando técnicas geométricas.

Uno de los problemas cruciales de la gravedad cuántica es la comprensión detallada del límite semiclásico de la teoría. Como es bien sabido, éste es un problema resuelto y bien entendido para teorías libres ya que se basa en la extensión de la definición de los estados coherentes del oscilador armónico a sistemas que constan esencialmente de un número infinito de osciladores. En el caso de teorías en interacción el problema es mucho más difícil de tratar. De hecho, ni siquiera para sistemas con un número finito de grados de libertad, distintos del oscilador armónico, se conocen estados que tengan todas las buenas propiedades de los conocidos estados coherentes. Dentro del esquema teórico proporcionado por las reducciones de simetría de Relatividad General es posible plantearse estos problemas en situaciones lo suficientemente simples como para permitir un tratamiento exacto. En particular las ondas de Einstein-Rosen, que pueden ser descritas mediante un hamiltoniano que es una función sencilla del correspondiente a una teoría libre, son especialmente útiles para discutir este tipo de cuestiones. Hemos obtenido un resultado sencillo pero muy relevante en este contexto: la demostración de que es imposible construir estados que se comporten como los estados coherentes habituales incluso en un ejemplo tan sencillo como es un hamiltoniano que dependa funcionalmente de uno libre.

En lo referente al estudio de límites de resolución espacial y temporal debidos a la presencia conjunta de efectos cuánticos y gravitatorios, hemos profundizando en el análisis de 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, que incluye una propuesta sugerida por nuestro Grupo, se basa en efectuar una implementación canónica en el espacio de fases. Esta implementación conduce a una geometría que depende *directamente* de la energía y momento del sistema. Nosotros hemos estudiado la relación entre todas las implementaciones canónicas de teorías de Relatividad Doblemente Especial que han aparecido en la literatura, y hemos podido demostrar que todas ellas son en realidad equivalentes.

Finalmente, para discutir el comportamiento de la incertidumbre temporal en Gravedad Cuántica, hemos analizado agujeros negros de tipo Schwarzschild-anti-de Sitter con posible contenido de radiación gravitatoria entre el horizonte y la región asintótica. Hemos utilizado el formalismo de horizontes aislados para estudiar con detalle las consecuencias de una redefinición no lineal de la masa de un agujero negro. El formalismo de horizontes aislados es un formalismo cuasilocal desarrollado para describir agujeros negros en equilibrio. En este formalismo, las posibles transformaciones hamiltonianas en el espacio de soluciones pueden identificarse con las elecciones aceptables de su función de masa (esto es, su energía). En presencia de escalas fundamentales, o incluso de la escala proporcionada por la constante cosmológica, distintas

funciones de masa pueden entenderse como el resultado de una modificación que incorpora efectos gravitatorios, por ejemplo respecto a un fondo de tipo Schwarzschild convencional. Para estos sistemas hemos demostrado que, en cualquier descripción cuántica perturbativa, surge una incertidumbre temporal estrictamente positiva debido a la escala de energía que introduce la constante cosmológica. Por contra, en un esquema de cuantización en el que los efectos de dicha escala se incluyan de manera no perturbativa, es posible alcanzar una resolución temporal tan grande como se desee. Al menos desde este punto de vista, la existencia de una incertidumbre temporal mínima no es una característica general inevitable en escenarios de Gravedad Cuántica.



Simulación de la deformación de los conos de luz en torno al horizonte de un agujero negro.

En los 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 llevado a cabo un análisis de los modos cuasinormales de configuraciones análogas a agujeros negros en esta clase de condensados. En este análisis, hemos usado la relación de dispersión de Bogoliubov completa, y no la mera aproximación hidrodinámica o geométrica para la descripción del horizonte. Hemos restringido nuestro estudio a flujos unidimensionales en condensados con discontinuidades de tipo escalón. Para este caso, hemos demostrado que no existen modos cuasinormales en la aproximación hidrodinámica. Sin embargo, la relación de dispersión completa sí que permite la existencia de dichos modos. En contra de lo que se podría esperar inicialmente, el espectro de tales modos cuasinormales resulta ser continuo en vez de discreto.

#### - Métodos computacionales en Física Gravitacional.

La Relatividad General de Einstein es una teoría geométrica del espaciotiempo gobernada por complicadas ecuaciones no lineales en derivadas parciales. Sólo en casos simplificados de muy alta simetría es posible desentrañar su contenido mediante lápiz y papel, por lo que el uso de técnicas computacionales se ha vuelto ahora indispensable para abordar problemas genéricos de interés astrofísico. Hay tres grupos de técnicas posibles: cálculo numérico, cálculo algebraico y desarrollos perturbativos. Nuestro Grupo utiliza todas ellas en diversos problemas y desarrolla herramientas específicas para su uso eficiente y sistemático. En particular durante el año 2007 hemos avanzado en los temas que describimos a continuación.

Nuestras técnicas y programas de cálculo algebraico tensorial eficiente nos han permitido resolver de forma práctica el problema clásico de las relaciones entre los invariantes escalares del tensor de Riemann, un problema al que se han dedicado específicamente varias docenas de artículos en las últimas décadas. Se trata de construir una base de monomios escalares del tensor de Riemann, y algoritmos capaces de expandir el resto de escalares como polinomios en aquéllos de la base. Estas relaciones son relevantes a la hora de analizar el problema de la renormalización de la gravedad de Einstein, o las múltiples generalizaciones de

la Relatividad General propuestas actualmente, entre otros. Nuestros algoritmos son completamente nuevos y se basan en una combinación de computación en tiempo real de las partes del cálculo que pueden realizarse rápidamente, y la consulta de una base de datos que también hemos construido para aquellas otras partes que no pueden tratarse eficientemente. Esos algoritmos y la base de datos han sido codificados en el paquete *Invar*, distribuido como software libre. A diferencia de los métodos que se habían aplicado anteriormente a este problema, fuertemente adaptados a dimensión cuatro con signatura Lorentziana, nuestros algoritmos son válidos en cualquier caso, y fácilmente generalizables a cualquier otro tensor.

Mediante esas mismas técnicas de cálculo tensorial hemos completado nuestro formalismo general de perturbaciones de orden arbitrario alrededor de la simetría esférica, especialmente diseñado para estudiar problemas de generación de radiación gravitatoria en fenómenos dinámicos aproximadamente esféricos, como el colapso gravitatorio de una estrella rotante. Concretamente hemos construido un conjunto de variables perturbativas que poseen la importante propiedad de ser invariantes gauge, lo cual permite extraer con mayor facilidad el contenido físico de esas variables. Para ello, ha sido necesario analizar los diversos conceptos de invariancia gauge presentes en la literatura, estudiando su relación, y escoger cuál de ellos era el más conveniente y flexible para nuestros propósitos.

En tercer lugar, hemos continuado nuestro estudio general de la fenomenología de colapso gravitatorio crítico mediante simulaciones numéricas. Se trata de preparar adecuadamente una distribución inicial de materia que, al colapsar bajo la acción de su propia gravedad, forme un agujero negro muy pequeño, y en el límite de ajuste infinito una singularidad desnuda. La existencia de este tipo de fenómeno tiene profundas consecuencias en Relatividad General porque permite la generación de zonas del espacio en las que la curvatura crece sin límite sin estar rodeadas por un horizonte de sucesos. Esto supone una de las mejores vías de acceso al régimen cuántico de la gravedad. Nuestro trabajo este año se ha concentrado en la recopilación y sistematización de todos los resultados producidos en este campo desde su comienzo en 1992, lo que ha dado lugar a la publicación de un *review* en una revista especializada en artículos de revisión en Relatividad.

#### **- Propiedades electrónicas de materiales de carbono de baja dimensionalidad.**

Desde el descubrimiento en 2004 de un nuevo material de carbono, consistente en láminas individuales de espesor atómico, se ha generado gran interés por el estudio de dicho agregado puramente bidimensional, denominado genéricamente como grafeno. Desde un punto de vista experimental, las hojas de carbono han mostrado ya un número de propiedades notables, entre las que se cuentan la cuantización anómala del efecto Hall y la existencia de un valor mínimo de la conductividad en el sistema sin dopar. Gran parte de las peculiaridades observadas en el material tienen su origen en una dinámica de las cuasipartículas gobernada por una ecuación de Dirac sin masa, que conduce a la aparición de un número cuántico adicional de pseudoespín en el espectro electrónico. Recientemente, ha habido experimentos donde se han medido las propiedades de transporte del grafeno cuando éste es contactado con electrodos superconductores. Así, se han podido observar supercorrientes fluyendo a través de la hoja de carbono, por debajo de la temperatura crítica de los electrodos.

En nuestra investigación teórica, hemos adoptado el tratamiento estadístico de la teoría de muchos cuerpos para entender el comportamiento de las uniones Josephson fabricadas con grafeno. Así, hemos descrito la aparición de las supercorrientes a partir de la transmisión por efecto túnel y propagación de pares de Cooper en la parte de grafeno de la unión, con el propósito de investigar la dependencia de las corrientes críticas en variables tales como la distancia entre contactos superconductores, la temperatura y el nivel de dopado.

Hemos demostrado que las supercorrientes tienen una tendencia natural a decaer en el grafeno, siguiendo en general una ley de potencias como función de la distancia  $L$  entre los contactos superconductores. Este desvanecimiento es particularmente fuerte en el grafeno sin dopar, como consecuencia de la nula densidad de estados en el punto de neutralidad de carga. Hemos determinado que las corrientes críticas siguen a temperatura cero una dependencia de tipo  $1/L^3$  como función de la distancia. A temperatura distinta de cero, se ha constatado la existencia de una longitud térmica (inversamente proporcional a la energía térmica) más allá de la cual las supercorrientes son todavía más fuertemente suprimidas, debido a la ruptura de los pares de Cooper por efectos estadísticos.

Por otra parte, se ha tenido en cuenta la forma en que los efectos estadísticos de muchos cuerpos pueden potenciar las corrientes críticas, en este caso por medio del desplazamiento del nivel de Fermi fuera del punto de neutralidad de carga. Esta situación se puede describir en nuestro marco teórico introduciendo un potencial químico  $\mu$  distinto de cero. Hemos visto que, induciendo de esta manera una densidad de estados

finita en el nivel de Fermi, las corrientes críticas se ven potenciadas más allá de una nueva escala de longitud, inversamente proporcional a  $\mu$ . A partir de esta escala los efectos de la densidad de estados finita se hacen sentir, provocando la transición de la anterior ley de potencias a un comportamiento de tipo  $1/L^2$  como función de la distancia entre electrodos.

Nuestra formulación a partir de la teoría de muchos cuerpos ha puesto también en evidencia que la gran ventaja de las uniones Josephson con grafeno proviene de la casi nula influencia de los efectos de la interacción de Coulomb, a las temperaturas requeridas para medir las supercorrientes. Esto representa una diferencia notable con respecto a las uniones unidimensionales hechas con nanotubos de carbono, donde la interacción electrónica repulsiva induce una fuerte supresión de la densidad de estados en el nivel de Fermi, con el consiguiente reflejo en el desvanecimiento de las supercorrientes. Por el contrario, en el grafeno bidimensional se constata la progresiva disminución de las correlaciones electrónicas a bajas energías, con una fuerte renormalización de la interacción de Coulomb que la convierte en prácticamente irrelevante a temperaturas del orden de 1 K.

Nuestros resultados sirven en definitiva para clarificar el papel que los diferentes parámetros del sistema desempeñan en la determinación de las corrientes críticas en uniones Josephson de grafeno. Se ha puesto de manifiesto que es la conjunción entre los efectos de la temperatura y del dopado lo que determina los diferentes regímenes de la unión. Desde un punto de vista práctico, nuestra investigación revela que sería posible establecer supercorrientes por encima de la escala de 1 nA sobre distancias de varios cientos de nanómetros, para niveles convenientemente altos de dopado. Los resultados obtenidos pueden ser útiles en el diseño de experimentos, con el propósito de amplificar la magnitud de las corrientes críticas en dispositivos electrónicos a partir del grafeno.

## **2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

### **LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:**

- Estudio experimental y teórico de la estructura y reacciones con núcleos estables y exóticos.
- Sistemas mesoscópicos. Transiciones de fase cuánticas. Modelos exactamente solubles. Caos cuántico. Decoherencia cuántica.
- Sistemas de tres cuerpos en Física Nuclear.
- Reacciones nucleares con sistemas de pocos cuerpos.
- Estructura y reacciones con núcleos estables y exóticos.
- Física de la Materia Condensada no cristalina.
- Instrumentación avanzada.

### **SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:**

- Estudios espectroscópicos de núcleos ligeros próximos a la línea de estabilidad nucleónica.
- Estudio del mecanismo de ruptura de estados excitados en múltiples partículas.
- Investigación y desarrollo de detectores y sistemas para partículas cargadas y radiación gamma. En particular, I+D para FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research).
- Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad en sistemas mesoscópicos. Modelos de Richardson-Gaudin.
- Transiciones de fase y caos cuántico. Evolución temporal en sistemas cuánticos. Estadística espectral.
- Transiciones electromagnéticas y capturas radiativas.
- Sistemas de tres cuerpos en el continuo, resonancias, funciones de onda y reacciones.
- Estudio de transiciones Gamow-Teller relevantes en Estructura Nuclear, Astrofísica y Física de Partículas. Desintegración beta simple y doble.
- Dispersión de electrones por núcleos. Observables de polarización.
- Estructura y dinámica microscópica de la materia condensada desordenada.
- Comportamiento físico a nano-escalas.
- Desarrollo de instrumentación avanzada para fuentes de neutrones de última generación.
- Algoritmos para visualización de datos masivos en espectroscopía neutrónica.

## TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Coincidencias gamma-gamma, detección de partículas cargadas.
- Tratamiento de reacciones nucleares. Detección en cinemática completa de todas las partículas o fragmentos, sus energías y distribuciones angulares para la reconstrucción del invariante de masas.
- Desarrollo propio del sistema experimental y del DAQ con más de cien parámetros.
- Simulaciones Montecarlo con GEANT4, MCNP (Monte Carlo N-Partículas).
- Técnicas de diagonalización a gran escala. Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. Representación de álgebras de Lie.
- Métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones de Faddeev en el espacio de coordenadas. Aproximación adiabática.
- Métodos de cálculo de campo medio autoconsistente.
- Dispersión de Neutrones.
- Simulación numérica.
- Técnicas calorimétricas.

## LABOR INVESTIGADORA

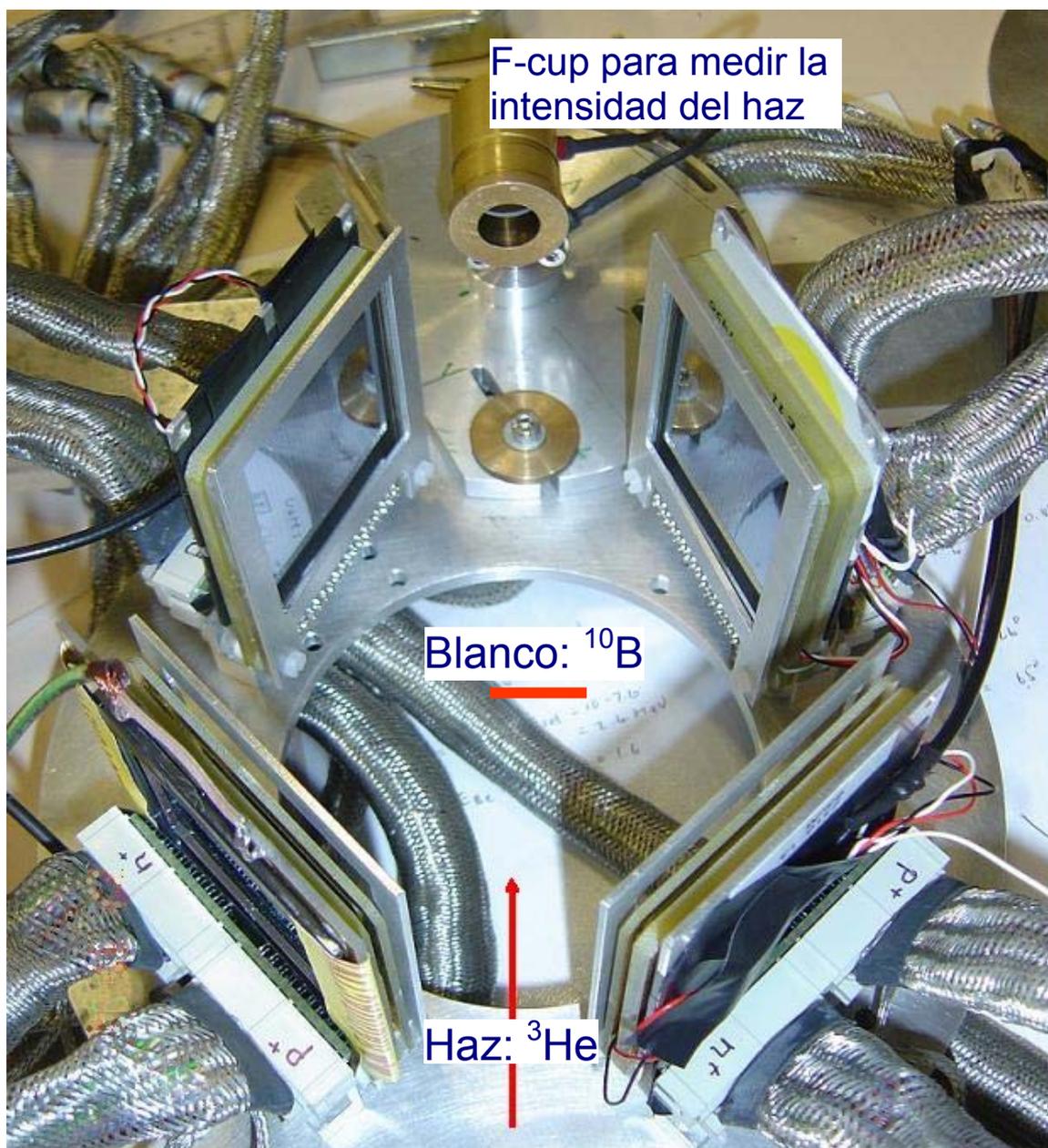
### - Caracterización de estados nucleares relevantes en procesos de núcleo-síntesis estelar.

Previamente hemos desarrollado técnicas que nos permiten profundizar sobre los modos de desintegración de núcleos exóticos y, especialmente, sobre la ruptura de estados no ligados. En la memoria de 2003-2006 informábamos del estudio en cinemática completa de las tres alfas provenientes de niveles de  $^{12}\text{C}$  poblados a partir de la desintegración  $\beta^+$  de  $^{12}\text{N}$  y  $\beta^-$  de  $^{12}\text{B}$ . Estos resultados afectan al ritmo de la reacción de triple alfa en el escenario estelar aumentando al doble la velocidad de fusión de  $3\alpha$  en estrellas primordiales ( $T < 10^8\text{K}$ ) y reduciendo la velocidad de formación de elementos pesados en la supernova ( $T > 10^9\text{K}$ ) [Nature **433**, 136 (2005)].

Continuando en la misma línea hemos estudiado los niveles excitados de baja energía de  $^9\text{Be}$  relevantes en el cálculo del ritmo 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 de excitación en  $^9\text{Be}$  y profundizado en el mecanismo de ruptura a  $n\alpha$  del nivel a 2.43 MeV que se ha explicado en la literatura a través de dos mecanismos diferentes: 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 completa 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.

La desintegración beta de  $^{11}\text{Li}$  puebla estados excitados en  $^{11}\text{Be}$  por encima de los umbrales de los canales  $^6\text{He}+\alpha+n$  y  $2\alpha+3n$  de emisión de partículas, constituyendo una multi-fragmentación en miniatura. La información sobre estados en  $^{11}\text{Be}$  por encima del umbral de emisión de partículas cargadas es escasa. Estudios previos de estos canales los describen como la ruptura de dos estados excitados a 10.5 y 18.2 MeV. El primer estado se desintegraría a través de un estado intermedio a 9.5 MeV en  $^{10}\text{Be}$  mientras que el segundo se fragmentaría directamente en 3 y 5 partículas. Sin embargo, en nuestro trabajo proponemos que la desintegración del estado a 18.2 MeV, y parte de la del estado a 10.5 MeV, ocurre en un proceso secuencial a través de isótopos resonantes de He, reforzando la idea de una estructura de cluster subyacente en  $^{11}\text{Be}$  [tesis de M. Madurga, Nuc. Phys. A en preparación].

Un nuevo experimento se realizó en ISOLDE, CERN, en septiembre de 2007 para confirmar estos nuevos canales que involucran isótopos de helio. El sistema experimental se mejoró para aumentar la eficiencia de detección de partículas cargadas en coincidencia. De esta manera se pudieron medir cinco veces más sucesos en coincidencia que en la anterior toma de datos. Los nuevos datos confirman la presencia de canales que involucran la emisión directa de partículas alfa. Se espera que el futuro análisis permita identificar el espín y paridad del estado de 18.2 MeV, y la posible contribución de otros estados excitados en  $^{11}\text{Be}$ .



Dispositivo experimental usado en el estudio de la ruptura de  $^{12}\text{C}^*$  en tres alfas, usando la reacción  $^{10}\text{B}(^3\text{He}, p\alpha\alpha\alpha)$ , inversa al proceso *triple alfa*. Cuatro detectores de Si de doble cara (DSSD) de 60 mm. de espesor; 16 bandas por 16 bandas  $\rightarrow$  256 pixel de  $3 \times 3 \text{ mm}^2$ . Resolución angular de 3 grados para detectar las cuatro partículas salientes en coincidencia y en cinemática completa. Detrás de cada DSSD hay un detector de Si de 1500 mm. de espesor para detectar la energía total de los protones, las partículas alfa se paran en los DSSSD.

Como complemento a estos trabajos hemos estudiado la reacción  $^{10}\text{B}+^3\text{He}$  cuyos canales a través de  $^{12}\text{C}$  y  $^9\text{B}$  nos dan información sobre estados no accesibles a la desintegración beta, complementando la información sobre la estructura de estos núcleos. Este trabajo está basado en experimentos realizados en la línea de Física Nuclear instalada en el Tandetrón del CMAM. El próximo experimento tendrá lugar en marzo de 2008.

En el estudio de la nucleosíntesis de elementos más pesados, el Dr. Galaviz ha continuado con los estudios de potenciales alfa-nucleares y su aplicación en cálculos de red del proceso-p astrofísico, y ha participado en un experimento de dispersión elástica de partículas alfa sobre los núcleos  $^{110}\text{Cd}$  y  $^{116}\text{Cd}$  a energías próximas a la barrera coulombiana en el laboratorio ATOMKI, Debrecen (Hungria). Complementariamente, ha trabajado en la preparación de experimentos de captura radiativa de partículas alfa en núcleos pesados usando la técnica de la activación. Se espera que dichos experimentos comiencen a realizarse en el CMAM a lo largo de la primera mitad de 2008.

Estos resultados se han presentado en tres conferencias: Int. Nuclear Physics Conference (INPC07, Tokio, Japón), Proton Emitting Nuclei (PROCON07, Lisboa, Portugal) y Clusters Conference (Clusters'07, Stratford-Upon-Avon, Reino Unido).

#### - Estudio de la desintegración beta de núcleos deficientes en neutrones.

Para núcleos muy alejados de la estabilidad, las diferencias de masa entre isóbaros crecen y la energía de enlace del último nucleón disminuye, de modo que la ventana de emisión beta permite explorar la estructura excitada de núcleo hijo más allá de los estados ligados, dando una buena información sobre la estructura nuclear del mismo. La información experimental sobre la fuerza Gamow Teller (GT) para núcleos ligeros con  $Z > N$  se ha obtenido a partir de la detección de  $\beta\gamma$  para la alimentación de estados ligados y  $\beta p$  y  $\beta p\gamma$  para la de los estados no ligados. En este contexto se ha estudiado la desintegración beta de los núcleos ligeros  $^{32,33}\text{Ar}$  ( $Z=18$ ) a partir del análisis de los datos del experimento realizado en GANIL (Francia) en junio de 2005. El motivo de este estudio es aportar nueva información sobre estos núcleos ligeros cercanos a la línea de goteo de protones, ya que recientemente se ha mejorado la capacidad de detección de partículas cargadas y radiación. Como resultado del análisis, y gracias al estudio de las coincidencias gamma-p, se han podido determinar las energías de excitación en  $^{35}\text{Cl}$  y  $^{32}\text{Cl}$  de los niveles emisores de protones (no ligados para la emisión de partículas), obteniendo así nuevas asignaciones para ciertos niveles (respecto a estudios anteriores) y confirmando otros resultados previos. Así mismo, la utilización de detectores con baja respuesta beta ha permitido observar emisiones de protones de baja energía que previamente no habían sido identificadas debido al gran fondo beta. Los resultados de dicho análisis constituyen el trabajo de investigación realizado por Ricardo Domínguez para obtener el DEA en diciembre de 2007. Además estos resultados han sido presentados en una contribución oral en la conferencia PROCON 07 (Lisboa, Portugal).

Las transiciones  $\beta$  superpermitidas de tipo Fermi  $0^+ \rightarrow 0^+$  son transiciones intrínsecamente simples, ya que implican la transformación de un protón en un neutrón que ocupará exactamente el mismo orbital. Estas transiciones son fundamentales para la comprensión de la interacción débil. En efecto, promediando las correcciones sobre la fuerza de transiciones (medidas  $ft$ ) que depende de la ventana energética ( $Q_\beta$ ), de la vida media del núcleo y de la razón de ramificación  $\beta$  para la transición superpermitida es posible determinar un valor universal  $Ft$  independiente del medio nuclear. Este tipo de medidas contribuyen a mejorar la precisión sobre los elementos de la matriz de mezcla de quarks ( $V_{ud}$ ) de Cabbibo-Kobayashi-Maskawa (CKM) del modelo estándar a través de la constante de acoplo de la interacción débil, responsable de la desintegración  $\beta$ . Con este objetivo, Jérôme Souin ha realizado un experimento en Jyväskylä (Finlandia) dedicado a medir con alta precisión la semi-vida de  $^{26}\text{Si}$ . El resultado obtenido,  $T_{1/2}=2.2283(27)$ , es cuatro veces más preciso que resultados anteriores. En el mismo experimento se ha registrado el espectro gamma, lo que permitirá determinar con alta precisión la razón de ramificación de las transiciones. La publicación de estos resultados está en preparación.

La determinación de la distribución de fuerza GT ha permitido también dilucidar, en la zona de fuertes transiciones de forma cercana al  $^{80}\text{Zr}$ , el signo de la deformación. La forma de la distribución GT y la fracción de la regla de la suma observada son muy sensibles a la estructura microscópica de los estados iniciales y finales involucrados en la desintegración. Para ello se construyó un espectrómetro de absorción total de radiación gamma que da directamente la alimentación beta a cada nivel a base de detectar la cascada de radiación gamma hasta el estado fundamental. En este contexto, la Dra Aránzazu Maira está estudiando la desintegración beta de  $^{72}\text{Kr}$ .

#### - Caracterización de núcleos con halo.

Dentro de las investigaciones realizadas en el estudio de núcleos con halo, el Dr. Daniel Galaviz ha completado el análisis de los datos del experimento IS444, realizado en ISOLDE, en el que se estudió la dispersión elástica de  $^{11}\text{Be}$  sobre un blanco de  $^{124}\text{Sn}$ . El objetivo del experimento era cuantificar el grado de polarizabilidad dipolar esperable en estos núcleos debido a su estructura de halo. Los resultados de dicho experimento han sido presentados en la conferencia FINUSTAR (Creta, Grecia). Siguiendo esta línea, el Grupo trabaja en la actualidad en la preparación de un experimento para el estudio de la polarizabilidad nuclear en el núcleo halo por excelencia:  $^{11}\text{Li}$ . El experimento para investigar la distribución angular del proceso de dispersión elástica sobre un blanco de  $^{208}\text{Pb}$  se llevará a cabo en el laboratorio canadiense TRIUMF a lo largo del verano de 2008.

### **- 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 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 de un sistema que nos permita la digitalización temprana de las señales de detectores de partículas cargadas obviando la electrónica intermedia, logrando 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. En test experimentales que se realizarán en los tandems del CMAM y CNA se testearán distintos preamplificadores que permitan obtener señales suficientemente rápidas.

La segunda línea de trabajo, enmarcada dentro de la colaboración R<sup>3</sup>B (Reactions with Relativistic Radioactive Beams) de FAIR (Facility for Antiprotons and Ion Research), consiste en el diseño de un detector sensible a 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 las multiplicidades y la energía individual. Para cumplir con las especificaciones de este proyecto, se han realizado simulaciones del comportamiento de materiales centelleadores de nueva generación, LYSO y haluros de lantano (componentes mayoritarios Lu-Y-Si-O y La-Br-Ce o La-Cl-Ce, respectivamente). 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 podemos simular la respuesta de diferentes geometrías con los materiales elegidos y escoger 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.

### **- Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad en sistemas mesoscópicos.**

Hemos estudiado diversos problemas relacionados con las propiedades dinámicas de sistemas cuánticos y sistemas fuertemente correlacionados unidimensionales mediante el Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG) y su versión dependiente del tiempo (TDMRG). En particular, consideramos cadenas de espín, cables cuánticos y sistemas de gases ultrafríos en redes ópticas. Las propiedades de entrelazamiento de dos sitios en cadenas cuánticas de fermiones polarizados proveen una información más detallada de las características de las transiciones de fase cuánticas. Estudiando estas propiedades y su escalamiento con el tamaño del sistema hemos establecido criterios para calcular numéricamente de forma muy precisa los valores críticos de los parámetros del sistema. Hemos estudiado los efectos de la commensurabilidad debidos a la red óptica en las ondas de densidad que aparecen en gases fermiónicos ultrafríos confinados.

### **- Modelos exactamente solubles para sistemas cuánticos de muchos cuerpos.**

Durante el año 2007 realizamos avances significativos en el estudio, generalización y aplicaciones de los modelos de Richardson-Gaudin (RG) a diversos sistemas cuánticos fuertemente correlacionados. La solución de modelos RG consiste en un conjunto de ecuaciones no lineales acopladas cuya resolución numérica se complica debido a la presencia de singularidades. Hemos estudiado el comportamiento de estas ecuaciones en las regiones críticas aligerando sus divergencias mediante la extensión al plano complejo. 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 nos permite tratar 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. El ansatz de Richardson que contiene el conjunto completo de autoestados provee una descripción única de los pares correlacionados también llamados pares de Cooper. Hemos estudiado la estructura de los pares de Cooper en núcleos pesados como el samario, mostrando que una pequeña fracción determina el estado superconductor y que su tamaño que su tamaño es comparable al tamaño del núcleo.

Extendimos el modelo de RG a las álgebras  $su(3)$  y  $so(8)$  de rangos 3 y 4 respectivamente. El primer caso describe sistemas de 3 niveles que pueden generalizar a los modelos de Jaynes-Cummings de interacción de

materia y radiación, mientras que el segundo representa un hamiltoniano de *pairing* protón-neutrón isoescalar e isovectorial. Realizamos un primer estudio en sistemas protón-neutrón, interpretando los resultados en términos del modelo de *iso-ckanking*, mostrando cómo la solución exacta contiene correlaciones de cuatro cuerpos que pueden dar lugar a la clusterización y condensación de partículas alfa.

#### - 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 estudiamos un modelo general de dos niveles bosónicos más allá de la aproximación de campo medio. Este modelo contiene el modelo nuclear de bosones interactuantes, así como también otros modelos físicos de dos niveles. Estudiamos su diagrama de fases y las propiedades del sistema cerca de las regiones críticas.

#### - Decoherencia y caos cuántico.

Hemos estudiado la relación entre decoherencia y caos cuántico en sistemas de espines. Hemos utilizado un sistema central de dos espines 1/2 acoplado a un baño del orden de 15 espines 1/2 para estudiar cómo la dinámica interna del baño influye en las propiedades de decoherencia del sistema central. En particular, hemos escogido una auto-interacción para el baño que transita completamente entre integrabilidad y caos; el límite integrable está constituido por un modelo XYZ de Gaudin, y el límite caótico se alcanza perturbando suficientemente el anterior. Una propiedad fundamental de este hamiltoniano es que mantiene su complejidad a lo largo de toda la transición entre integrabilidad y caos, al contrario que la gran mayoría de los hamiltonianos de muchos cuerpos estudiados hasta la fecha. Las conclusiones que hemos obtenido son las siguientes. En primer lugar, la relación entre decoherencia y caos depende de la constante de acoplo entre el sistema y el baño: para valores pequeños, el límite regular produce una mayor decoherencia; para valores grandes, esta tendencia se invierte. En segundo lugar, hemos concluido que el ritmo de decaimiento de magnitudes ligadas a la decoherencia, como la entropía lineal y el eco de Loschmidt, no dependen directamente de la dinámica del baño, sino de la complejidad de éste: para un hamiltoniano igualmente complejo en los límites caótico e integrable, estas magnitudes decaen al mismo ritmo en ambos extremos.

Asimismo, hemos estudiado la estadística espectral de espectros bariónicos medidos experimentalmente y de los obtenidos mediante diversos “modelos quarks”. Con este trabajo, pretendíamos aclarar el problema de las *missing resonances*: estados predichos por los modelos quarks que no se han obtenido en los experimentos. La principal conclusión obtenida es la siguiente. Mientras que la estadística espectral de los espectros experimentales es caótica, la de todos los modelos quarks analizados es integrable. En consecuencia, dado que estos modelos no son capaces de reproducir una propiedad global básica como la estadística espectral, su capacidad predictiva para estados concretos es dudosa. De esta manera, la existencia de los niveles predichos por los modelos quarks y no encontrados experimentalmente queda en entredicho.

#### - Funciones de onda del continuo en sistemas de tres cuerpos: Resonancias, modos de desintegración y reacciones.

El método de la expansión adiabática en armónicos hipersféricos ha sido desarrollado en los últimos años por miembros de nuestro Grupo en estrecha colaboración con el Grupo de Física Nuclear de la Universidad de Aarhus (Dinamarca). El objetivo inicial era estudiar los núcleos con halo de dos neutrones, tanto su estructura como reacciones de fragmentación a alta energía. Posteriormente, combinándolo con el método de rotación compleja, el mismo procedimiento se puede emplear para estudiar estados resonantes en sistemas de tres cuerpos. Esto permite investigar también los estados excitados no ligados de los núcleos con halo, su estructura y sus procesos de desintegración. El comportamiento asintótico de la función de onda contiene la información sobre el tipo de desintegración, secuencial o directo, y en particular la probabilidad que cada uno de estos procesos de desintegración tiene. Por otra parte, la aplicación de estos métodos no se limita obviamente a núcleos con halo, sino que es aplicable a cualquier sistema físico (moléculas, átomos, núcleos...) que forme un sistema de tres cuerpos. Así, hemos investigado no ya  $^{11}\text{Li}$  o  $^6\text{He}$ , sino, entre otros,  $^{17}\text{Ne}$  ( $^{15}\text{O}+p+p$ ),  $^5\text{H}$  ( $^3\text{H}+n+n$ ),  $^6\text{Li}$  ( $\alpha+n+p$ ),  $^6\text{Be}$  ( $\alpha+p+p$ ),  $^{12}\text{Be}$  ( $^{10}\text{Be}+n+n$ ) o los estados excitados del  $^{12}\text{C}$  que se pueden tratar como un sistema formado por tres partículas  $\alpha$ .

De forma general, el objetivo principal de nuestro trabajo ha sido el seguir avanzando en el desarrollo de las técnicas para el estudio de sistemas de tres cuerpos y explotar sus posibilidades en diversos campos de la Física Nuclear, profundizando en el estudio de sistemas de tres cuerpos en los que interviene la interacción coulombiana. Un tratamiento preciso de la función de onda a largas distancias es básico para entender cómo se desintegran las resonancias de núcleos como, por ejemplo,  $^{12}\text{C}$  o  $^9\text{Be}$ . También pretendemos estudiar reacciones nucleares a baja energía en las que intervienen este tipo de sistemas. En este punto distinguiremos dos tipos de reacciones, por un lado procesos de captura radiativa, que desempeñan un papel muy importante en procesos de nucleosíntesis estelar, y en particular en lo que se refiere al salto de los puntos de espera o *waiting points*, y por otro lado procesos específicamente nucleares, colisiones tanto entre un sistema de dos partículas y un blanco, como colisiones entre tres partículas, para las cuales las particularidades de los potenciales adiabáticos asociados al método de expansión adiabática permiten distinguir de manera sencilla entre los distintos canales: elástico, inelástico, ruptura o *breakup*, y reconfiguración o *rearrangement*.

#### **- Deformación nuclear, desintegración $\beta$ y doble desintegración $\beta$ .**

Durante el presente año hemos continuado con el estudio de las distribuciones energéticas de Gamow-Teller (GT) y las vidas medias de desintegración beta en núcleos exóticos mediante formalismos teóricos basados en cálculos autoconsistentes de Skyrme-Hartree-Fock deformado incluyendo correlaciones de apareamiento en aproximación BCS y fuerzas residuales de tipo espín-isospín tratadas en aproximación QRPA. En particular, hemos estudiado los efectos de la deformación nuclear en las distribuciones energéticas de Gamow-Teller correspondientes a isótopos de la región del plomo deficitarios en neutrones, encontrando una triple coexistencia de forma esférica/oblada/prolada tal y como se observa experimentalmente. 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 los patrones de desintegración beta como una signatura de la deformación nuclear que puede inferirse simplemente observando el modo en que el núcleo se desintegra.

Hemos continuado también con el estudio de 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 en que, por un lado, el isótopo  $^{136}\text{Xe}$  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.

Se ha iniciado asimismo el estudio sobre un nuevo enfoque para el tratamiento de la doble desintegración beta con emisión de neutrinos basado en la aproximación de cierre mediante cálculos deformados de HF+BCS. En esta aproximación, los elementos de matriz nucleares entre los estados inicial y final son evaluados sin necesidad de recorrer todos los estados virtuales del núcleo intermedio.

#### **- Formación de cortezas neutrónicas en núcleos esféricos y deformados.**

En sistemas nucleares pesados y semipesados ricos en neutrones, el exceso de los últimos frente al número de protones hace posible la aparición de cortezas neutrónicas caracterizadas por colas en la superficie del núcleo de materia puramente neutrónica. Hemos investigado la formación de estas cortezas neutrónicas como función del número de neutrones en diversos isótopos que abarcan desde los isótopos estables hasta los muy ricos en neutrones. Para ello utilizamos un formalismo teórico de Estructura Nuclear basado en cálculos deformados autoconsistentes de Hartree-Fock que incluyen correlaciones de apareamiento. La información experimental que existe sobre estas cortezas es muy escasa y está basada en métodos que incluyen dispersión de hadrones por núcleos, así como resonancias dipolares gigantes y resonancias dipolares de espín.

En nuestro trabajo analizamos diferentes posibles modos de definir la corteza neutrónica basados tanto en los radios de protones y neutrones como en las colas espaciales de sus respectivas densidades. Estos resultados los comparamos entre sí y con la información experimental existente. Hemos encontrado que prácticamente todas esas posibles definiciones convergen en predecir la existencia de cortezas neutrónicas

para isótopos lejos de la línea de estabilidad. Estas cortezas crecen con el número de neutrones de una forma lineal, aunque con pendientes que dependen de la definición utilizada.

Finalmente, estudiamos el papel desempeñado por la deformación nuclear en la aparición y evolución de la corteza neutrónica. Hemos encontrado que las densidades de protones y neutrones, y especialmente sus colas espaciales, cambian según la dirección en que se midan y son distintas en núcleos oblatos o prolados. No obstante, el grosor de las cortezas neutrónicas obtenidas es prácticamente independiente de la dirección.

#### **- Física de la Materia no cristalina.**

Probablemente los resultados más remarcables obtenidos durante 2007 en el presente epígrafe son los referidos al comportamiento microscópico del hidrógeno adsorbido en nuevas nanoestructuras carbonosas [Phys. Rev. Lett. **98**, 077801 (2007)], así como la observación de dinámica microscópica anómala en el líquido más simple con puentes de hidrógeno. En el primer caso se ha podido estudiar, gracias al desarrollo de una novedosa técnica de dispersión inelástica de neutrones, la naturaleza del enlace entre el sustrato carbonoso de las nanoestructuras denominadas nanocuernos (*nanohorns*) y el hidrógeno adsorbido. En particular, los resultados muestran una interacción mucho más intensa para estas nanoestructuras que en el caso de los llamados nanotubos (*nanotubes*), lo que abre unas buenas perspectivas para estas nanoestructuras en lo que se refiere al almacenamiento de hidrógeno. En el segundo caso, se ha podido observar mediante la dispersión cuasielástica de neutrones un comportamiento anómalo en la dinámica microscópica estocástica del ácido fluorhídrico predicho en simulaciones numéricas recientes: la ruptura de lo que se conoce como la relación de Stokes-Einstein que relaciona el comportamiento difusivo y disipativo en un sistema en equilibrio térmico.

Cabe destacar también el estudio de la dinámica microscópica de líquidos metálicos [Phys. Rev. B **75**, 224202 (2007); Phys. Rev. B **76**, 174201 (2007)], de líquidos moleculares simples [Phys. Rev. B **76**, 134203 (2007)], el comportamiento térmico anómalo en líquidos super-enfriados y vidrios [Phys. Rev. B **76**, 214204 (2007)], así como la dinámica de espín de determinadas estructuras magnéticas [Phys. Rev. B **76**, 184401 (2007)].

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

Las actividades dentro de este epígrafe conciernen por un lado 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 2007 se han llevado a cabo labores de diseño y construcción de varios componentes para instrumentos en construcción en ISIS-TSII.

Por otro lado, se ha iniciado el proyecto FETS o "FRONT END TEST STAND". Se trata de un banco de pruebas para el desarrollo de la próxima generación de aceleradores de protones de alta potencia. El interés en disponer de haces de protones con estas características radica en sus aplicaciones directas como inyectores en fuentes de neutrones por espalación, factorías de neutrinos y en transmutación de residuos mediante *Accelerator Driven Systems*.

## **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. Espectroscopía IR de hielos de interés atmosféricos.
- 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 chorros supersónicos de gases.
- Agregación molecular en chorros de gases.
- Transferencia de energía en colisiones moleculares inelásticas.
- Tasas de transferencia de energía rotacional en procesos colisionales.
- Parámetros espectroscópicos de moléculas relevantes 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. Espectroscopía de emisión visible. Sondas de Langmuir. Microbalanza.
- Haces moleculares supersónicos. Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI). Cálculos dinámicos.
- Espectroscopía Raman lineal. Chorros supersónicos de gases. Criogenia.
- Espectroscopía Raman Estimulada.
- Doble resonancia Raman-Raman.
- Simulación numérica.

#### LABOR INVESTIGADORA

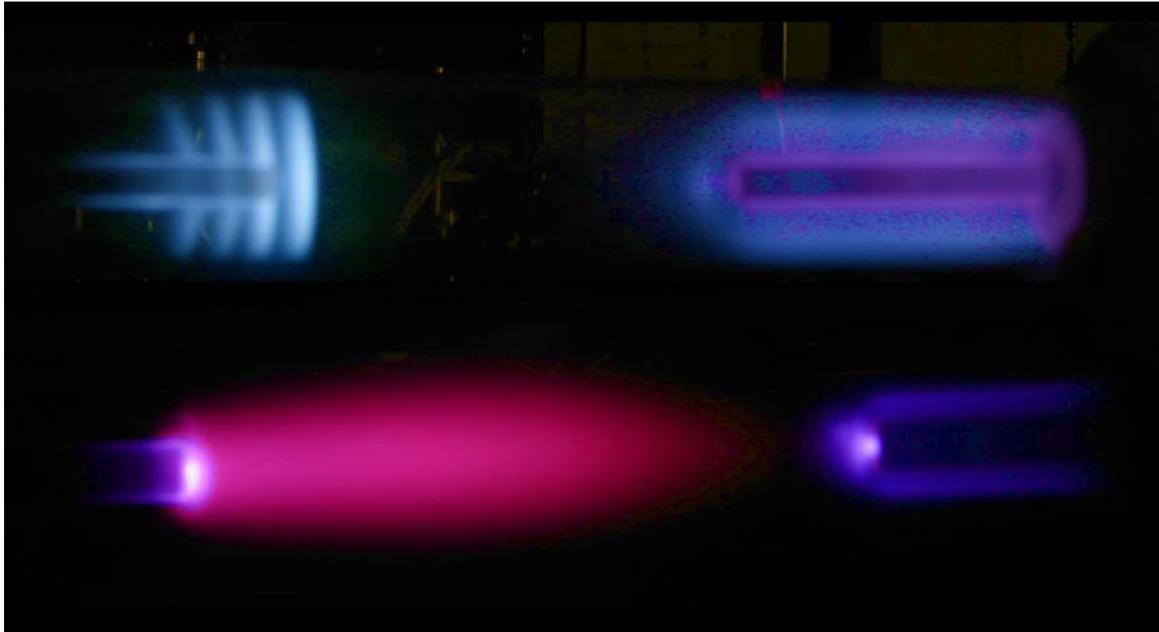
##### - Físico-Química de la atmósfera. Espectroscopía IR de hielos de interés atmosférico y astrofísico.

El trabajo teórico se centra en el estudio de la estructura y propiedades ópticas de cristales de hielo con diversos gases de interés atmosférico o astrofísico ( $\text{HNO}_3$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{CO}_2$ ) 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 avanzado en el proyecto de cálculos *ab initio*, en colaboración con el Prof. Pedro Gómez de la Universidad Complutense, sobre las posibles estructuras ternarias de moléculas de agua, ácido nítrico y ácido clorhídrico, con el que se pretende estudiar los tipos de enlace que pueden ocurrir entre estas moléculas en los cristales ternarios atmosféricos. Además, dentro de la colaboración con el Prof. Gómez, se han realizado cálculos de estructuras y frecuencias en diferentes conformaciones de los hidratos del  $\text{ClO}$ , compuestos de gran interés en la química del ozono atmosférico. Estos cálculos se llevan a cabo con el programa Gaussian 03.

Dentro de la parte experimental se han continuado los estudios de espectroscopía RAIR y de transmisión de capas de diversos “hielos”. Las últimas medidas han estado centradas en hielos que pueden tomarse como análogos a los componentes de núcleos de cometas. En concreto se han publicado sendos artículos sobre los resultados obtenidos por las citadas técnicas de espectroscopía para el sistema  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ . La principal conclusión, con posibles implicaciones astrofísicas, es la existencia de dos especies bien diferenciadas en las que el  $\text{CO}_2$  puede estructurarse en su asociación con hielos de agua amorfa. Hemos denominado a estas especies  $\text{CO}_2$  “interno” y “externo” o “adsorbido”. Continuamos trabajando sobre este tema desde el punto de vista energético y estructural. Por otro lado, con el objetivo de ampliar el rango de temperaturas accesible, en el año 2007 se ha adquirido un criostato de ciclo cerrado de helio. Este equipo permite estudiar hielos entre temperatura ambiente y 6 K, y amplía enormemente el número de moléculas condensables.

Asimismo, se ha diseñado y está en fase de construcción una célula de flujo para generación de aerosoles, con la que se estudiarán las propiedades ópticas de aerosoles de interés atmosférico, tales como aerosoles de sales marinas, compuestos orgánicos, etc.

En estas líneas de trabajo teórico y experimental colaboran varios componentes del departamento, tanto investigadores senior, como personal de apoyo y estudiantes. Puede consultarse la página web <http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/fmap/main.htm> para obtener más detalles sobre esta línea de investigación y el personal que la ejecuta. En la citada página web, y más adelante en esta Memoria, se recogen las publicaciones del Grupo en este año.



Plasmas fríos generados en una descarga DC de aire a baja presión ( $P \sim 1$  mbar,  $V \sim 1000$  V), y diferentes corrientes.

#### - Cinética de plasmas fríos a baja presión.

La mayor parte de la materia visible en el Universo se presenta en forma de plasma. Los plasmas son relevantes además en gran número de procesos tecnológicos. Nuestra investigación se dirige al diagnóstico y modelado cinético de plasmas fríos, es decir, plasmas con un grado de ionización relativamente bajo y electrones a elevadas temperaturas ( $\sim 40000$  K), pero con iones y especies neutras próximas a la temperatura ambiente. Empleamos descargas DC de gases moleculares a baja presión en reactores de cátodo hueco. Para el diagnóstico experimental de los plasmas utilizamos espectrometría de masas cuadrupolar de iones y especies neutras (en este caso, tras ionización por impacto electrónico), así como espectroscopía dispersiva de emisión en el visible y sondas eléctricas. Esto nos permite determinar la temperatura electrónica y la densidad de carga eléctrica del plasma, e identificar buena parte de las especies involucradas (tanto precursores, como productos estables, radicales o iones) y en ocasiones sus temperaturas. Las simulaciones cinéticas se basan en la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (una para cada especie) dependientes del tiempo, mediante el programa Facsimile.

Principalmente nos ocupamos del estudio de plasmas de óxidos de nitrógeno y de aire, con el fin de reproducir procesos de interés relacionados con la ionosfera terrestre; y de plasmas de  $H_2$  con mezclas de  $CH_4$  o  $N_2$ . Estos últimos tienen aplicación en los procesos de interacción plasma-superficie de reactores experimentales de fusión controlada, y se estudia en colaboración con la División de Fusión del CIEMAT. Pueden encontrarse más detalles sobre esta línea de investigación en la página web mencionada en el apartado anterior, en la sección de plasmas.

Los resultados del pasado año en descargas de  $H_2$  puro condujeron, entre otros resultados, a la obtención de concentraciones muy relevantes del ión  $H_3^+$ , especie de gran interés en el medio interestelar por su contribución a la formación de numerosas especies moleculares a baja temperatura mediante reacciones sin barrera. En esta línea, durante el presente año hemos profundizado en el estudio de plasmas de  $H_2$  con trazas de Ar,  $CH_4$  y  $N_2$  ya iniciado anteriormente, confirmándose la existencia de una química muy compleja entre iones y especies neutras, que provoca la aparición de abundantes especies iónicas protonadas como  $ArH^+$ ,  $N_2H^+$ ,  $NH_4^+$ ,  $CH_3^+$ ,  $CH_5^+$ ,  $C_2H_4N^+$ ...

En nuestra colaboración con el CIEMAT, se ha comenzado el estudio de recubrimientos carbonados sobre muestras de Si y acero inoxidable mediante descargas de  $He+CH_4$ . Tales recubrimientos han sido sometidos posteriormente a diferentes procesos como depósito de Mg por evaporación, y oxidación, tanto térmica como mediante descargas de  $He+O_2$ , a fin de observar la erosión de dichos recubrimientos y cambios de sus capacidad de retención de hidrógeno.

También se ha concluido y publicado una revisión de los últimos avances en cuanto a deposición química en fase vapor a baja presión asistida por plasma y sus aplicaciones a muy diferentes campos científicos y tecnológicos, 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 utilizados hasta la fecha.

#### - Dinámica y cinética de reacciones químicas.

En el marco de nuestra Unidad Asociada con el Departamento de Química Física de la Universidad Complutense hemos continuado el estudio sobre el posible papel de la estructura cuántica del estado de transición en el control de la reactividad. En concreto se han aplicado un formalismo “cuasiclasico” y uno cuántico al estudio de probabilidades acumulativas de reacción para el sistema prototípico D+H<sub>2</sub>. La comparación de los resultados de ambos métodos muestra que ciertas restricciones a la reactividad, atribuidas por algunos autores a “cuellos de botella cuánticos” en el estado de transición [cf Zhang et al. Phys. Rev. Let. **96**, 093201 (2006)], pueden explicarse como limitaciones estereodinámicas del potencial del sistema triatómico sin necesidad de considerar una cuantización del complejo activado.

#### - Fluidodinámica Molecular.

Se ha continuado trabajando en la agregación de hidrógeno molecular. En esta línea se han registrado nuevas series de medidas en expansiones criogénicas de *para*-H<sub>2</sub> y de H<sub>2</sub> normal, mezclas de *para*-H<sub>2</sub> y *orto*-H<sub>2</sub> en distintas proporciones, así como mezclas de *para*-H<sub>2</sub> con He. Se han empleado toberas de 30 y 50 micras, con temperaturas entre 27 y 100 K, y presiones entre 0,3 y 4 bar, y se han registrado las zonas espectrales de vibración (4160 cm<sup>-1</sup>) rotación del monómero *para*-H<sub>2</sub> (354 cm<sup>-1</sup>), rotación del monómero *orto*-H<sub>2</sub> (590 cm<sup>-1</sup>), y de rotación de los agregados (0-5 cm<sup>-1</sup>). Con estas medidas se han detectado por vez primera agregados de *orto*-H<sub>2</sub> y agregados mixtos de *para*-H<sub>2</sub> y *orto*-H<sub>2</sub>, y se ha recopilado un cuerpo de conocimiento considerable acerca de la condensación del hidrógeno, del que se espera extraer información novedosa acerca de las condiciones detalladas para la formación de agregados de un determinado tamaño, su cinética de formación, así como de las características espectrales y estructurales de las nuevas especies observadas por vez primera.

En otra línea de trabajo se han realizado medidas de expansiones a temperatura ambiente de mezclas de *para*-H<sub>2</sub> con He y de H<sub>2</sub> normal con He. Con estas medidas se han determinado experimentalmente por primera vez las tasas de transferencia nivel-a-nivel para colisiones inelásticas rotacionales, y se espera poder ampliar el intervalo de temperaturas, tanto en el extremo de altas (>200 K) como de bajas (<20 K) temperaturas, de gran interés para el estudio de colisiones a muy baja energía.

Por otra parte, se ha continuado con el estudio de expansiones supersónicas generadas a través de una tobera de rendija, que da lugar a expansiones de carácter bidimensional. Dentro de este estudio se solventaron dificultades experimentales para el registro preciso de la dispersión Rayleigh en expansiones donde se produce condensación, para así poder evaluar cuantitativamente la formación de agregados. En concreto se analizó exhaustivamente el comportamiento de los agregados de CO<sub>2</sub> al atravesar las ondas de choque frontales que aparecen en las expansiones. Por otro lado se trabajó en la determinación de la posición de las ondas de choque con distintas condiciones de presión de estancamiento y presión residual, poniéndose de manifiesto el paso del carácter bidimensional al tridimensional de estas expansiones para distancias a la tobera de rendija mayores que su longitud.

En el apartado instrumental se han incorporado unos controladores de flujo másico que permiten generar en línea mezclas precisas de gases para su expansión, y se han mejorado diversos aspectos de la cámara de expansiones como el brazo soporte de la lente sustituyéndolo por uno nuevo de cuarzo, lo que resulta en una mucha mayor estabilidad térmica, o una nueva brida adaptada al criostato de la tobera, que permite trabajar con una trampa de luz directa para el láser, lo que ha redundado en una reducción apreciable del fondo de luz difusa de la cámara. Esta mejora, unida a otras encaminadas a reducir el reflejo del láser en la tobera, y en combinación con el filtrado de la radiación elástica mediante una célula de yodo a temperatura estabilizada, nos ha permitido registrar con éxito los espectros cercanos a la línea Rayleigh. Además se ha incorporado un controlador de temperatura criogénica al conversor *orto-para*-H<sub>2</sub> lo que permite operar con mayor estabilidad y controlar la proporción *orto/para* resultante.

Finalmente, en el aspecto de fluidodinámica computacional, en colaboración con el Instituto de Modelado Matemático de la Academia de Ciencias de Rusia, se ha continuado con la simulación de chorros de nitrógeno a través de ondas de choque en expansiones supersónicas, teniendo en cuenta los grados de libertad rotacionales.

### **- Ensanchamientos colisionales de líneas espectrales de moléculas de interés atmosférico o presentes en procesos de combustión.**

Se han completado los estudios de ensanchamiento colisional en el espectro Raman de alta resolución del sistema  $N_2-N_2$ . El estudio completo incluye medidas a temperaturas entre 77 K y 580 K, un cálculo de una superficie de potencial *ab initio* y cálculos de ensanchamientos basados en modelos *Close Coupling*, *Coupling States* y semiclásicos, dependiendo de las temperaturas, habiendo así establecido el intervalo de temperaturas de validez o aplicabilidad de cada modelo y la fiabilidad de extrapolación a más altas temperaturas para diagnósticos en procesos de combustión.

También se han realizado medidas de ensanchamiento colisional en el sistema  $CH_2-CH_2 - H_2$ . Se han realizado medidas a 143 K mediante la técnica de espectroscopía Raman coherente para completar el intervalo de medida de trabajos previos a temperaturas superiores (realizadas con técnicas de absorción IR) y para comprobar un nuevo potencial *ab initio* de este sistema desarrollado en la Universidad de Rennes, con la que colaboramos. Basados en este potencial, están en curso los cálculos de ensanchamiento colisional para comparar con las medidas de laboratorio.

Se han concluido los estudios de viabilidad de un *Raman Shifter* para una fuente láser a 2  $\mu m$  en combinación con un OPO (Oscilador Paramétrico Óptico) para la construcción de un sistema LIDAR a bordo de un satélite de la Agencia Europea del Espacio. Los resultados obtenidos han dado lugar a dos notas técnicas de la mencionada Agencia.

Se ha puesto a punto una nueva técnica para la medida de tasas de transferencia colisional de energía en moléculas en fase gaseosa a baja densidad.

Como sistema de prueba para la puesta a punto de la técnica se ha elegido el  $C_2H_2 - C_2H_2$ . La técnica consiste en la preparación de un estado vibracionalmente excitado (en este caso  $v_2=1$ ) en el que mediante un proceso de bombeo Raman estimulado se puebla un solo estado rotacional. A continuación, mediante espectroscopía Raman estimulada se sigue la evolución de las poblaciones rotacionales en  $v_2=1$  en función del tiempo y la densidad a través de la evolución del espectro  $v_2=2 \leftarrow v_2=1$  en función del tiempo y/o la densidad.

La actividad principal durante el año 2007 ha consistido en el desarrollo y puesta a punto de la técnica experimental y códigos de cálculo para la extracción de los parámetros colisionales, que han sido completados y han permitido ya la obtención de los primeros datos experimentales sobre este sistema.

## **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.

### **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  $\text{HCO}^+$ , 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 ( $\text{SiC}$ ,  $\text{C}_3\text{H}$ ,  $\text{C}_6\text{H}$ ,  $\text{C}_7\text{H}$ ,  $\text{C}_8\text{H}$ ,  $\text{MgNC}$ ,  $\text{HC}_4\text{N}$ ,  $\text{C}_4\text{H}$  en estados vibracionales excitados, etc.). Los nuevos instrumentos pondrán en evidencia una riqueza molecular en el espacio sin precedentes. La interpretación de nuevos datos requiere una preparación previa basada en la predicción de las estructuras, frecuencias e intensidades de las moléculas potencialmente interesantes.

Las experiencias de laboratorio que actualmente se realizan en el IEM y en otros institutos del CSIC en Serrano poseen un enorme interés para la interpretación de las observaciones y para la preparación de la explotación de grandes proyectos como ALMA, HERSCHEL y el JWST. El satélite HERSCHEL es una de las "piedras angulares" de la Agencia Espacial Europea que se construye en colaboración con NASA. El telescopio es un paraboloide de 3,5 metros refrigerado pasivamente a 90 K. Se lanzará en el 2007 y estará equipado con tres instrumentos que cubrirán el dominio de 16 a  $166\text{ cm}^{-1}$  con resolución espectral, R, de  $10^6$ - $10^7$  (instrumento HIFI,  $16$ - $60\text{ cm}^{-1}$ ),  $R=1500$  (instrumento PACS,  $60$ - $166\text{ cm}^{-1}$ ) y  $R=600$  (instrumento SPIRE  $16$ - $60\text{ cm}^{-1}$ ). El instrumento HIFI es el primer receptor heterodino refrigerado a 2,7 K 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 en 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. El JWST, considerado el sucesor del telescopio espacial Hubble, es un proyecto liderado por NASA, en colaboración con ESA (Agencia Europeas de Espacio) y CSA (Agencia Canadiense del Espacio), y representa uno de los retos científico-tecnológico más ambiciosos de la Astronomía. Este telescopio, cuyo lanzamiento está previsto para 2013, tiene un espejo primario segmentado de 6,5m., optimizado en el infrarrojo y estará situado en una órbita L2, a 1,5 millones de kilómetros de la tierra. Los objetivos científicos de este proyecto se centran en cuatro grandes temas: i) La detección de la conocida como "Primera Luz", la radiación de los primeros objetos luminosos del Universo. ii) La formación y evolución de galaxias. iii) La formación estelar y de sistemas

protoplanetarios. iv) La detección y caracterización de planetas fuera del sistema solar y el origen de la vida. Para llevar a cabo estos estudios el telescopio estará equipado con tres instrumentos científicos principales: 1- NIRCам: una cámara optimizada en el infrarrojo cercano, entre 0.6 y 5 micras; 2- NIRSspec: un espectrógrafo multiobjeto y de campo integral entre 0,6 y 5 micras; y 3- MIRI una cámara y espectrógrafo operativo entre 5 y 28 micras. Desde el punto de vista instrumental, Europa participa en la construcción de NIRSspec (responsabilidad de ESA) y MIRI a través de una colaboración paritaria entre NASA y un consorcio de países europeos. DAMIR concentra la mayor parte de la participación científica en el JWST, a través de su participación en NIRSspec y MIRI, instrumentos en los que está fuertemente involucrado. Los nuevos instrumentos abrirán ventanas del espectro electromagnético que son inaccesibles con los instrumentos actuales. Desde el punto de vista de la Físico-Química del medio interestelar (galáctico o extragaláctico), dichos instrumentos van a permitir acceder a las regiones de formación de planetas, determinar las condiciones físico-químicas iniciales cuando los discos protoestelares y protoplanetarios se forman, etc. Desde el punto de vista de la cosmología y de la astronomía extragaláctica, la sensibilidad de ALMA, HERSCHEL y el JWST van a permitir acceder a la observación de un gran número de objetos de alto redshift formados en la primera generación de galaxias después del Big-Bang. Mientras que la Astrofísica Molecular se ha limitado esencialmente a nuestra galaxia, los nuevos instrumentos extenderán el dominio de dicha rama de la Astrofísica al mundo extragaláctico (complejidad química, abundancias isotópicas, etc.). Asimismo, los estudios extragalácticos que en la actualidad se llevan a cabo en el DAMIR con galaxias relativamente cercanas, podrán llevarse a cabo en objetos mucho más lejanos, o equivalentemente, en los objetos que formaban el Universo en sus fases más tempranas.

Todas las líneas de trabajo descritas más abajo y enmarcadas en el contexto de ALMA, HERSCHEL y el JWST requieren una preparación preliminar que será efectuada en los próximos años a nivel observacional, teórico y de laboratorio (espectroscopía, cinética química, etc.). Las principales líneas de investigación del DAMIR, y los principales resultados obtenidos en el 2007, son:

#### - 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  $\text{NNH}^+$ .
- Búsqueda de nuevas especies moleculares. Complejidad química. Finalización del survey espectral de Orión.
- Transferencia de radiación en nubes moleculares. Estudio del caso de  $\text{H}_2\text{O}$  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 rol de los electrones en la excitación colisional de  $\text{HCO}^+$ .
- 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 protoplanetesimales: Observación de las zonas más internas de objetos protoestelares. Determinación de las condiciones físicas de las condensaciones de gas de masa subestelar.
- Química de la interacción del gas eyectado a gran velocidad por las nuevas estrellas y el medio circundante: dicha interacción se produce en zonas de  $10^{13}$ - $10^{14}$  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  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}^+$ , CH, OH, etc.).

- Transferencia de radiación en 3-D: La resolución angular de ALMA permitirá distinguir la contribución de las diferentes regiones a la emisión de una especie molecular dada. El desarrollo de códigos robustos, rápidos y de probada convergencia será una de las líneas prioritarias de nuestro departamento.
- Obtención de los parámetros moleculares necesarios para la interpretación de las observaciones (secciones de colisión, intensidad de las líneas/bandas, constantes espectroscópicas) a través de cálculos *ab initio*. La nueva visión del Universo que proporcionará ALMA requerirá de un conocimiento mucho más preciso de los parámetros moleculares. En los próximos años nuestro departamento analizará los problemas más urgentes en el campo de la química-física de las moléculas más abundantes del medio interestelar (secciones de colisión CO, H<sub>2</sub>O, HCN, CN con H<sub>2</sub> 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.

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

En 2007 los principales resultados en el estudio del Medio Interestelar han sido:

- Dos artículos en el *Astrophysical Journal* sobre la excitación de NNH<sup>+</sup> en nubes frías.
- Un *survey spectral* en el infrarrojo lejano de la nube del centro galáctico SgrB2.
- La detección del agua pesada, D<sub>2</sub>O, en el medio interestelar.
- La detección del anión C<sub>4</sub>H<sup>-</sup>.
- El estudio de una estrella joven de baja masa y su flujo bipolar, HH111.
- La detección de los isótopos <sup>13</sup>C de CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub> y CN en Orión. Los tres isótopos <sup>13</sup>C han sido también caracterizados en el laboratorio.
- La detección de H<sub>2</sub>D<sup>+</sup> en el infrarrojo lejano lo que permite estudiar esta molécula con los instrumentos de Herschel no sólo en nuestra galaxia si no también en galaxias cercanas.
- La detección del propileno, CH<sub>3</sub>CHCH<sub>2</sub>, en TMC1. Esta molécula es uno de los hidrocarburos más abundante de las nubes moleculares y el hidrocarbón más saturado encontrado hasta ahora en el espacio (ver figura adjunta).
- El estudio detallado de la química de moléculas orgánicas en L1448 y L183.
- El estudio de la asociación de estrellas jóvenes en la región de Cep A.
- Detección del disco de acrecimiento que colima el radio jet CepA HW2.

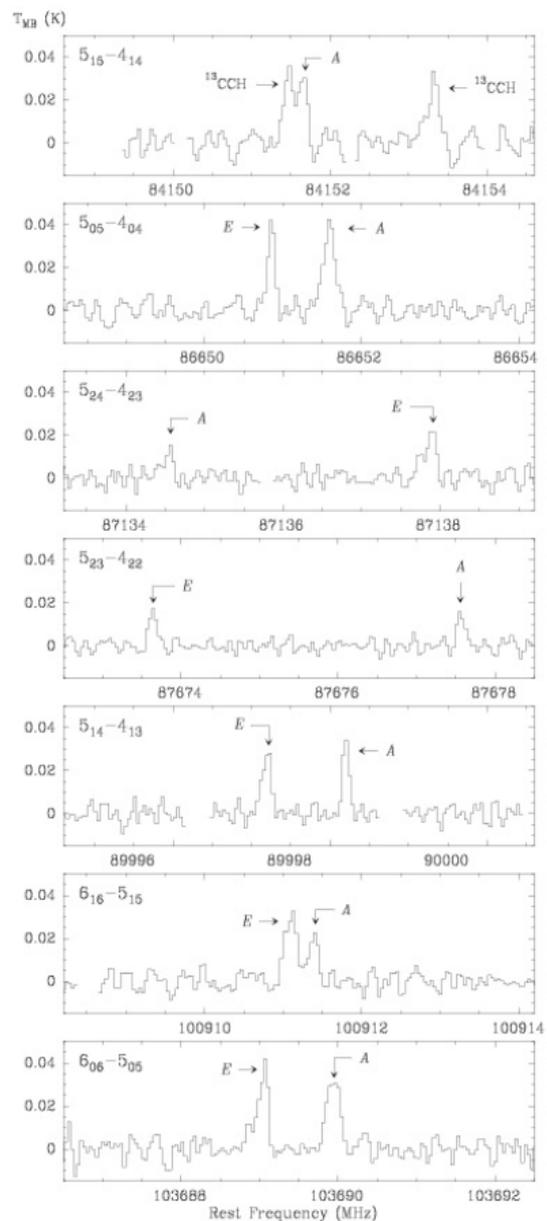


Figura: Transiciones observadas surgidas tanto de especies A como B de CH<sub>3</sub>CHCH<sub>2</sub>. La frecuencia en reposo se calcula para un v<sub>LSR</sub>=5.6 Km s<sup>-1</sup>.

### **- Complejidad química en el núcleo de la Vía Láctea.**

Se ha puesto de manifiesto que las moléculas orgánicas más complejas hasta ahora detectadas solamente en las regiones de formación de estrellas masivas se encuentran en todo el núcleo de la Vía Láctea. Sorprendentemente, todas las moléculas orgánicas detectadas en el centro galáctico tienen abundancias relativas a metanol prácticamente iguales en todas las nubes y aumentan cuanto más hidrogenadas son. Estos resultados sugieren que las moléculas complejas se forman en los mantos helados de los granos de polvo por hidrogenización y oxidación. El hecho de que todas las nubes presenten la misma abundancia apoya la hipótesis de una composición universal de los mantos helados de los granos en toda la región del centro galáctico. Las grandes abundancias de estas moléculas en fase gaseosa, que requieren que se eyecten por medio de choques frecuentes, confirman que el calentamiento del gas en el centro galáctico está dominado por frecuentes choques.

Se ha establecido que la complejidad química puede ser un excelente trazador de los diferentes procesos que tienen lugar en las regiones más oscurecidas de los núcleos de galaxias externas. Además de las altas abundancias de las moléculas orgánicas complejas que trazan el calentamiento por choque de velocidad moderada, se ha encontrado que la abundancia de HNCO disminuye en más de un orden de magnitud en las regiones afectadas por la fotodisociación producida por los fotones UV emitidos por los cúmulos de estrellas masivas en el centro galáctico.

### **- Formación e interacción con el medio de estrellas de baja masa.**

Se han medido las abundancias de moléculas complejas asociadas con las regiones de formación estelar de baja masa y choques recientes. Los resultados son consistentes con que la hipótesis de una composición universal de los mantos helados de los granos de polvo en el centro galáctico puede ser también aplicable a las nubes moleculares del disco. Sin embargo, las abundancias de las moléculas orgánicas complejas se alteran por la química asociada con los procesos que tienen lugar en las primeras etapas de la formación de las estrellas de baja masa.

### **- Formación de estrellas de alta masa.**

Se han realizado varios estudios de la región de formación estelar HW2 en en la región de Cefeo A. Se ha establecido que lo que hasta ahora se pensaba que era una única protoestrella, es en realidad un proto-cúmulo estelar. Se han detectado varios núcleos calientes que requieren la presencia en su interior de estrellas de masa intermedia. Este descubrimiento explica la presencia de varios flujos bipolares que son eyectados en diferentes direcciones por dichas protoestrellas. La protoestrella más luminosa eyecta un jet ionizado de muy alta velocidad. En esta protoestrella se han realizado observaciones de muy alta resolución angular, detectando por primera vez el disco que lo colima. Nuestros resultados muestran cómo el disco se está fotoevaporando debido a la ionización del gas por los fotones ultravioleta de la protoestrella.

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

- Estudio de la emisión máser de HCN, SiO, H<sub>2</sub>O, 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<sub>n</sub> (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.

En 2007 se ha finalizado un barrido espectral entre 80 y 115 GHz de la estrella carbonada IRC+10216. Varios artículos han sido publicados relacionados con la química de este objeto y la modelización de la emisión molecular. En este contexto hemos detectado por primera vez en el espacio la molécula HCP. El análisis detallado de la emisión molecular en CRL618, una nebulosa protoplanetaria, también rica en carbono, ha sido publicado en el *Astrophysical Journal* en 2007. El estudio ha permitido construir una representación detallada de las condiciones físicas, la morfología y las abundancias químicas en este objeto.

#### **- 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 aquéllos 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.

En el 2007 se han realizado varias contribuciones al estudio de la función inicial de masa de la asociación de Arches, el estudio empírico de la dependencia de pérdida de masa de estrellas O y B con la metalicidad de dichos objetos y un estudio de estrellas supergigantes rojas en el brazo Scutum-Crux de nuestra galaxia.

#### **- 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 en laboratorio, los datos teóricos son las únicas fuentes adicionales de información de la que se dispone. De esta manera, los cálculos *ab initio* representan una herramienta fundamental de la Astroquímica, y el medio interestelar representa una fuente de datos experimentales que permiten evaluar los métodos teóricos más sofisticados. Por esta razón, consideramos que un Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja debe de incluir un área de Estructura Molecular Teórica.

#### **- Galaxias y Cosmología Observacional.**

El Grupo extragaláctico del DAMIR está interesado en el estudio de galaxias infrarrojas luminosas (LIRGs) y ultraluminosas (ULIRGs) tanto en el Universo Local como a distancias cosmológicas. 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 circunuclear en la galaxia NGC 7469 (Díaz Santos, Alonso Herrero, Colina), y se ha detectado por primera vez la contrapartida óptica de una supernova radio (Colina, Díaz-Santos, Alonso Herrero). Almudena Alonso es investigadora principal de una propuesta de 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 2007, 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 de 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 se ha expandido al infrarrojo medio utilizando observaciones con el telescopio Gemini de 8 metros (Díaz Santos, Alonso Herrero, Colina). En particular se ha estudiado 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. Por último Almudena Alonso ha sido investigadora principal con el telescopio de rayos X de la ESA XMM-Newton y ha obtenido 270 Ks para observar una submuestra de LIRGs. Las observaciones se realizarán a lo largo de 2008. Durante 2007 también se ha obtenido una buena parte de los datos de una muestra de (U)LIRGs del hemisferio sur con el VLT (Very Large Telescope), con el instrumento VIMOS. Asimismo se han reducido y analizado los primeros datos de este programa. En concreto se han estudiado dos galaxias representativas de subclases de LIRGs, las cuales han sido caracterizadas tanto desde un punto de vista físico como cinemático, permitiendo el estudio de sus fases dinámicas. Este trabajo nos ha permitido también desarrollar y poner a punto las técnicas para el tratamiento y análisis de este tipo de datos, que por su naturaleza, son especialmente complejas (Arribas, Colina, Alfonso, García Marín, Alonso Herrero). También se han realizado observaciones adicionales de las muestras del hemisferio norte con los instrumentos INTEGRAL y PMAS, y análisis preliminares de algunos de estos objetos (Alfonso).

## 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. Se han llevado a cabo simulaciones de la capacidad de multiplexado del instrumento NIRSpec en modo multi-objeto, con aplicación directa en el campo del "Ultra Deep Field" (UDF), la imagen más profunda del Universo en longitudes de onda visible. Asimismo se ha evaluado, mediante simulaciones de observaciones de galaxias lejanas, las pérdidas de luz debidas a la máscara MEMS con la que se configura las rendijas de entrada a NIRSpec (Arribas). 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 2007 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 AGNs seleccionados en rayos X a desplazamientos al rojo intermedios ( $z=1$ ) en colaboración con investigadores de la University of Arizona, University of Oxford, University of Durham, 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 ( $\sim 10-15$  Kpc) parece afectar fuertemente a la formación estelar de la galaxia anfitriona.

- En el campo de la Astrofísica Molecular se ha detectado HNC y CN en la dirección de un objeto de redshift 3,9 y se ha realizado un estudio detallado de choques en galaxias y de sus trazadores moleculares.

**- Contribución al desarrollo de instrumentación internacional.**

- *Atacama Large Millimeter Array (ALMA).*

Continuación de los trabajos de seguimiento para garantizar 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.

Contrato con el European Southern Observatory para la caracterización de las láminas semitransparentes del sistema de calibración de ALMA.

- *Heterodyne Instrument for the Far Infrared (HIFI) embarcado en el satélite Herschel.*

Desarrollo de herramientas para la reconstrucción de mapas de la emisión molecular a gran escala realizados con la técnica de cartografía rápida.

Desarrollo de herramientas para la visualización y análisis de datos de cubos obtenidos con HIFI y con interferométricos.

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 James Webb Space Telescope (JWST).*

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

Diseño detallado del simulador criogénico MTS.

Participación en el grupo científico.

Participación en el grupo de verificación y calibración.

- *Near Infrared Spectrograph (NIRSpec) del James Webb Space Telescope (JWST).*

Participación en los paneles de revisión intermedia del sistema (IRS).

Participación en el taller del equipo del JWST (JWST partners workshop).

Evaluación de la capacidad de multiplexado.

Estudio de las pérdidas de radiación asociadas al sistema de entrada MEMS.

Simulaciones de observaciones con NIRSpec del UDF.

Participación en el equipo científico.

- *Preparación del programa científico de GTC.*

Participación en la elaboración del programa científico del instrumento CanariCam.

Organización de reuniones científicas del equipo internacional (Reino Unido, E.E.U.U., México, España).

- *Estudio de un espectrógrafo para el telescopio ELT (Extremely Large Telescope).*

- *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).

Chairman del ASAC.

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

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

Mission Scientist de Herschel.

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

Miembro del grupo de Trabajo de Seguimiento de ALMA.  
Miembro del panel de evaluación del instrumento HIFI de Herschel.

- Jesús Martín-Pintado Martín:

Presidente del grupo de Trabajo de Seguimiento de ALMA.  
Miembro del Comité de Dirección del instrumento HIFI de Herschel.  
Responsable de la Contribución del CSIC al ICC del HIFI (Herschel).  
Responsable de la coordinación y gestión de la contribución del MEC a ALMA.  
Miembro del Astronomy Working Group de la ESA.  
Miembro del Comité Científico de Evaluación del Research & Scientific Support Department de la ESA.  
Miembro del Comité para evaluar el Plank Science Ground Segment Implementation Review.  
Vicepresidente del HIFI Users Group.

- Santiago Arribas Mocoero:

Miembro del equipo científico de NIRSpec.  
Responsable del nodo CSIC del proyecto FP7-ELIXIR (EarLy Universe Exploration with NIRSpec).  
Responsable de la contribución del CSIC al consorcio HARMONI, instrumento del ELT (Extremely Large Telescope).

- 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.  
Miembro del equipo científico del instrumento CanariCam del GTC.

- Francisco Najarro Parra:

Representante español en ESI (European Spica Instrument), instrumento europeo para SPICA.  
Miembro del comité de asignación de tiempo (TAC) de los telescopios nocturnos de Canarias.

- Almudena Alonso Herrero:

Miembro del comité de asignación de tiempo (TAC) del telescopio espacial de la NASA Spitzer.

## **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 Deposición y Ablación.

### **SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN**

- Espectroscopía vibracional de correlación 2D aplicada a biomoléculas.
- Estructura de sistemas biológicos en alimentos.
- 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 Raman (SERS) y Fluorescencia (SEF).
- 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.

- Espectroscopía de plasma inducido por láser (Laser Induced Breakdown spectroscopy, LIBS).

#### **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.
- Compresión-relajación.
- Espectroscopía Óptica de Emisión (OES).
- Espectroscopía Inducida por Láser (LIF).

#### **LABOR INVESTIGADORA**

##### **- Espectroscopía vibracional de correlación 2D aplicada a biomoléculas.**

Se han puesto a punto accesorios portamuestras de espectroscopía infrarroja y Raman para realizar *in situ* intercambio isotópico H/D. Los accesorios están dotados de membranas de diálisis y características apropiadas para resolver en el tiempo el intercambio isotópico de diversos elementos estructurales de proteínas y ácidos nucleicos, en particular  $\alpha$ -hélices, láminas- $\beta$ , acodamientos y estructura desordenada en proteínas, y tripletes y pares de bases en ácidos nucleicos. Sobre esta base se están iniciando por espectroscopía de correlación 2D la estructura de complejos ácido nucleico-proteína de interés viral.

##### **- Estructura de sistemas biológicos en alimentos.**

Dentro de un proyecto financiado por la Unión Europea (Proyecto FP6-506359) se ha estudiado por espectroscopía Raman la estructura de alimentos reestructurados de pescado picado con fibra dietética de trigo (FDT) añadida a ellos con el fin de explicar las bases moleculares de las propiedades reológicas y sensoriales de estos alimentos. Similarmente a lo que ocurre en geles de surimi, la FDT ejerce un papel deshidratante como consecuencia de las fuertes interacciones moleculares fibra-agua. Esta propiedad deshidratante se puede atribuir a la celulosa como componente mayoritario de la FDT, lo que viene apoyado por el hecho de que dicha propiedad no la tienen otras fibras que contienen celulosa envuelta por lignina hidrofóbica.

##### **- Relación entre estrés oxidativo y estructura proteica cerebral por microespectroscopía infrarroja.**

Como continuación del proyecto ya iniciado en colaboración con el Instituto S. R. Cajal (CSIC), se han estudiado mediante microespectroscopía infrarroja y análisis multivariante muestras de corteza e hipocampo cerebrales de roedores tratados con diversos fármacos. Se ha demostrado que algunos compuestos nicotínicos atenúan los cambios estructurales de carácter amiloideo y estrés oxidativo originados por la administración de anfetaminas. Para este tipo de muestras se ha puesto a punto por primera vez un método de determinación espectroscópica de peróxidos utilizando espectroscopía de derivadas que guarda buena correlación con los métodos bioquímicos convencionales. (Proyecto FMM-2004).

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

###### *1 Preparación de nanopartículas metálicas o "quantum dots".*

Una de las investigaciones básicas de nuestro Grupo durante este año ha sido la preparación de superficies nanoestructuradas metálicas innovadoras y con altas prestaciones optoelectrónicas para ser aplicadas en técnicas espectroscópicas de intensificación basadas en localización de plasmones superficiales, SERS, SEIRA y SEF. Se han propuesto diferentes métodos de preparación que se exponen más abajo.

La fotorreducción inducida por radiólisis mediante haces láser, es una técnica desarrollada en los últimos tiempos en nuestro laboratorio para el análisis *in situ* de moléculas a nivel de trazas. En este sentido, se ha mejorado el método de preparación de nanopartículas de Ag por irradiación láser *in situ* sobre interfaces 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 para las moléculas de interés empleadas en

este periodo. Este método permite el análisis *in situ* de moléculas y materiales diversos sin necesidad de una extracción previa de los mismos.

Asimismo, se ha avanzado en el desarrollo de métodos de preparación de nanopartículas “limpias” por estar desprovistas de impurezas o especies interferentes en los espectros vibracionales y/o electrónicos. Los métodos empleados han sido: a) reducción de plata mediante radiólisis inducida por radiación gamma, b) radiólisis inducida por haces electrónicos pulsados, y c) la producción de películas metálicas por deposición mediante láser pulsado (*Pulsed Laser Deposition*). Para llevar a cabo los dos primeros métodos fue imprescindible la colaboración con el Grupo de la Dra. Armida Torreggiani del ISOF/CNR en Bolonia (Italia), ya que fueron necesarias las grandes instalaciones existentes en este instituto [“gamma cell” y acelerador lineal de partículas (LINAC)], para llevar a cabo la nanofabricación de nanopartículas de Ag, Au y Cu.

Otra línea de interés en este apartado ha sido la fabricación de sistemas metálicos mixtos Ag/Au. Los métodos ensayados han sido dos: a) fabricación de aleaciones Ag/Au, por reducción simultánea de Ag y Au, y b) fabricación de partículas mixtas tipo “core/shell”. Estos sistemas se han caracterizado mediante resonancia de plasmones y microscopía (TEM, SEM y AFM), y SERS, lo que ha permitido obtener una valiosa información acerca de la distribución de los metales en las partículas resultantes, así como determinar su efectividad en SERS.

## 2 Funcionalización de superficies metálicas.

Como en años precedentes, una parte importante del trabajo dentro de este proyecto se ha dedicado a 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, permitiendo así obtener 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 funcionalizados con el grupo ditiocarbamato (DTC) en la parte inferior ha constituido un elemento innovador que nos ha permitido obtener sistemas metal/ensamblador con altas prestaciones en la detección de contaminantes del tipo de los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs). Estos sistemas combinan la alta capacidad de ensamblaje de los calixarenos con la alta afinidad del grupo DTC respecto a las superficies metálicas, aumentando el rendimiento de estos sistemas. Las superficies así obtenidas presentan una gran afinidad respecto a los contaminantes anteriores gracias a la creación de cavidades intramoleculares de gran especificidad.

Otro grupo de moléculas empleadas en la funcionalización de superficies metálicas ha sido el de los viológenos. Estos compuestos interactúan fuertemente con el metal a través de la formación de pares iónicos o complejos de transferencia de carga entre el viológeno y el haluro previamente unido al metal. Los viológenos son compuestos con gran deficiencia electrónica, lo que facilita su ensamblaje con moléculas donadoras de electrones como son muchos contaminantes persistentes mediante un mecanismo de transferencia de carga. Los viológenos bifuncionales mejoran extraordinariamente las prestaciones de estas sustancias por actuar como creadores de puntos de alta intensificación del campo electromagnético (en inglés *hot spots*) de gran interés para la espectroscopía SERS.

Dentro del ámbito de la funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas, una línea de gran interés desarrollada en los últimos años en nuestro Grupo 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. Así por ejemplo, una funcionalización ensayada con éxito ha sido la llevada a cabo con oligopéptidos de conocida afinidad por metales. Las características de selectividad y sensibilidad de estos nuevos sistemas mixtos metal/péptido se están ensayando en la actualidad en relación a su potencial empleo en la detección de contaminantes.

Finalmente, la funcionalización de electrodos metálicos es una técnica que ha aportado más luz al análisis de la interacción de adsorbatos sobre metales al permitir un análisis de esta interacción a potenciales eléctricos variables. La técnica se ha aplicado con éxito en el estudio de la reducción de viológenos,

fundamentalmente lucigenina y diquat, encontrándose interesantes fenómenos que explican el mecanismo de interacción adsorbato-metal y de interacción intermolecular adsorbato-adsorbato al variar el potencial eléctrico aplicado. Por otra parte, se están ensayando nuevos métodos de funcionalización de electrodos metálicos basados en técnicas “layer-by-layer”, mediante las que se pretende también la inmovilización de dendrímeros y coloides metálicos sobre la superficie metálica del electrodo.

### 3 Creación de “hot spots” en nanopartículas metálicas mediante funcionalización con diaminas.

Las características morfológicas de las partículas metálicas pueden ser modificadas mediante moléculas bifuncionales, dando lugar a patrones de agregación favorables para la técnica SERS. El empleo de moléculas bifuncionales da lugar a la creación de puntos de alta intensidad de campo (*hot spots*) con interesantes aplicaciones en espectroscopía, como son los espacios intersticiales entre nanopartículas metálicas, que están entorno a 1 nm de distancia. La introducción de cargas eléctricas en moléculas bifuncionales permite además crear cavidades intermoleculares interesantes para la interacción con moléculas cuya detección sea de interés (contaminantes, fármacos), que quedarían así localizadas en estos puntos de alta intensidad de campo. Las diaminas alifáticas de longitud de cadena variable han permitido obtener resultados importantes en la detección de contaminantes PAHs y pesticidas como endosulfán o aldrín a muy bajas concentraciones. En la actualidad se está investigando la influencia de la longitud de la cadena en el plasmón resultante a partir de dímeros de nanopartículas construidas mediante la agregación inducida con diaminas.

### 4 Fluorescencia intensificada por superficies metálicas (SEF).

Durante este último año hemos dedicado grandes esfuerzos al desarrollo de la técnica SEF (*Surface-Enhanced Fluorescence*), desgranando los procesos físicos y químicos que intervienen en la intensificación de la emisión fluorescente. En este sentido, hemos encontrado que la funcionalización de nanopartículas metálicas es crucial en SEF, ya que la intensificación de la fluorescencia requiere de un cierto distanciamiento del fluoróforo respecto al metal. La técnica SEF ha sido fundamentalmente aplicada al estudio de pigmentos y fármacos fotoactivos, así como sustancias de interés medioambiental como las sustancias húmicas y sus complejos con pesticidas y PAHs. El objetivo final de este trabajo consistirá en la aplicación conjunta de las técnicas SERS, SEIRA y SEF en la caracterización de sistemas moleculares de alta complejidad estructural.

La aplicación conjunta de las espectroscopías SERS y SEF ha permitido obtener 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. Estas técnicas han sido también aplicadas con éxito en el caso de fármaco emodina. La aplicación conjunta de la espectroscopía de fluorescencia y el Raman “stop-flow” ha permitido estudiar el mecanismo de interacción de este fármaco con la albúmina de suero bovina (BSA).

### - 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.

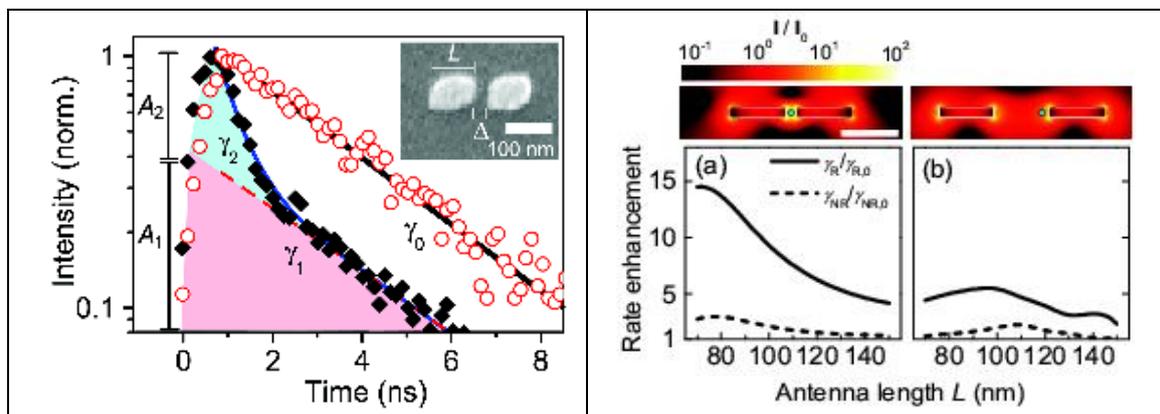
En particular, en este pasado año nuestros esfuerzos se han centrado mayoritariamente en la aplicación de la espectroscopía SERS al análisis de los pigmentos polifenólicos flavonoides. Estas moléculas también han sido empleadas como pigmentos en tejidos históricos, además de presentar unas interesantes propiedades biológicas dado su carácter antioxidante. A pesar de su enorme importancia son muy pocos los trabajos de caracterización de estas moléculas mediante espectroscopía vibracional, lo que se atribuye tanto a su alta fluorescencia como a su enorme inestabilidad. 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. La conclusión más importante es que estas moléculas sufren una importante modificación química sobre la superficie metálica dando lugar a polímeros, lo que constituye un problema para su estudio. Durante este año se han deducido las bases moleculares de la inestabilidad de estos compuestos así como la naturaleza química de los productos generados.

Se ha profundizado en la aplicación de métodos de estudio de pigmentos *in situ* mediante inmovilización de nanopartículas metálicas sobre superficies por irradiación con láser. Este estudio ha consistido en la obtención de las condiciones óptimas para la fotorreducción aplicada al estudio *in situ* de pigmentos sobre superficies de distinta naturaleza. Finalmente se ha aplicado con éxito la fotorreducción en el análisis de tejidos patrón teñidos con flavonoides, obteniéndose información selectiva de los pigmentos empleados en la tinción. Este método ha permitido no solamente el reconocimiento de los flavonoides existentes en el colorante, sino también hacer una estimación de su cantidad relativa. El análisis mediante espectroscopía SERS de tejidos teñidos siguiendo técnicas empleadas en el pasado ha permitido deducir interesantes conclusiones, como el hecho de que los flavonoides más hidrofóbicos se fijan más fuertemente sobre tejidos de mayor carácter hidrofóbico, como la lana.

Finalmente, en relación con el Patrimonio, se continúa con la aplicación de la espectroscopía Raman en la caracterización de materiales de construcción y la degradación de sulfatos por formación de compuestos minerales como la taumasita y la generación de carbonato cálcico, en sus diferentes formas, sobre electrodos metálicos, trabajo éste que se está llevando a cabo en colaboración con investigadores del 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 SEF y SERS.

Se ha investigado teórica y numéricamente la dispersión de luz y acoplamiento con plasmones superficiales localizados sobre nanoestructuras metálicas tipo nanoantena (monómeros y dímeros). Se han caracterizado las resonancias plasmónicas asociadas a nanopartículas de formas diversas, con especial énfasis en intensificación del campo EM. Mediante un modelo semiclásico, se ha estudiado la intensificación de la fluorescencia (y Raman) de moléculas aisladas situadas a distancias nanométricas de dichas nanoantenas. En particular, en colaboración con el Dr. Jaime Gómez Rivas y colaboradores de FOM-Institute AMOLF (Amsterdam) y Philips Research Labs (Eindhoven), se han reproducido e interpretado medidas experimentales de la intensificación de los factores de decaimiento radiativo y no radiativo (y de la eficiencia cuántica) de colorantes sobre nanoantenas metálicas tipo dímeros rectangulares acoplados óptimamente (véase la figura).



Izquierda: Medida de la fluorescencia de un colorante sobre una nanoantena (imagen SEM en el recuadro superior derecho), en resonancia, dentro (rombos negros) y fuera de la nanoantena (círculos rojos), mostrando en el primer caso la componente rápida inicial ( $\gamma_2$ ) por la intensificación de la densidad local de estados electromagnéticos. Derecha: Cálculos de la modificación de la emisión espontánea para un dipolo emitiendo a 730 nm, situado en la posición de acoplamiento máximo con la nanoantena y orientado paralelo al eje del dímero. Se muestra la intensificación de las componentes radiativa y norradiativa del decaimiento en función de la longitud del brazo de la antena  $L$ , en los casos de (a) antena fuertemente acoplada y (b) desacoplada. (Parte superior) Mapas de intensidad de campo electromagnético alrededor de las dos antenas iluminadas con una onda plana monocromática de bombeo; los puntos indican la posición de los dipolos emisores en los cálculos previos.

Por otro lado, se ha desarrollado un modelo riguroso de la emisión espontánea colectiva (coherente e incoherente) por películas moleculares (tipo Langmuir-Blodgett) situadas sobre interfases, que se puede

incorporar fácilmente a formulaciones de *scattering* rigurosas para cálculos numéricos en el caso de nanoestructuras y nanopartículas metálicas complejas, determinando así rigurosamente factores de intensificación SERS colectivos.

#### **- Propagación y dispersión de polaritones-plasmones.**

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 (PPS, ondas EM superficiales híbridas entre fotones rasantes y oscilaciones del plasma electrónico), 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 demostrado que nanoestructuras acanaladas periódicamente distribuidas en una interfase metálica, con vacantes en la red, dan lugar a estados de *gap* para dichas ondas superficiales, con comportamientos análogos a dispositivos ópticos tipo *distributed-feedback gratings*.

#### **- Estudio de la ablación inducida por radiación láser infrarroja.**

Estamos llevando a cabo estudios de los procesos de ablación en diferentes sistemas:

- Polimetil metacrilato (PMMA) dopado con iodofenodreno y iodonaftaleno.
- Films de tejidos biológicos (gelatinas).
- Láminas de Ni o Co en atmósfera de benceno.

Láminas de PMMA dopadas con iodonaftaleno y iodofenantreno y encastradas en sustratos de  $F_2Ca$  fueron ablacionadas con la línea 10P(20) del láser de  $CO_2$ . Mediante LIF, en configuración de bombeo y prueba a 266 nm, hemos detectado la formación de NapH y PhenH, comprobando que, por encima del umbral de ablación, la formación de los fotoproductos está prácticamente completada después de 200 ms. Mediante microscopía óptica hemos comprobado la formación de filamentos y burbujas en las áreas irradiadas dependiendo el tamaño de estas últimas del peso molecular del PMMA ablacionado.

Hemos iniciado el estudio de la ablación de tejidos biológicos (gelatinas) mediante radiación láser IR en comparación con el proceso inducido por láser de exímeros a 266 y 355 nm. Mediante LIF, en configuración de bombeo y prueba a 266 nm, hemos detectado la formación de ditirosina, estando en estos momentos en el proceso de diseñar el montaje experimental que nos permita estudiar la dinámica de formación de este fotoproducto. Hemos visto además que, para fluencias de irradiación relativamente pequeñas, se forman una gran cantidad de burbujas que podrían estar relacionadas con la estructura de espuma que se forma por irradiación en el UV.

En colaboración con el Grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa) y con el fin de obtener nanoestructuras de metal/polímero realizamos experiencias de ablación mediante láser IR de láminas de Ni o Co en atmósfera de benceno. Mediante OES hemos comprobado la formación simultánea en fase gaseosa de átomos metálicos y especies atómicas y moleculares provenientes del benceno cuando la presión de este último es menor de 20 mb. Hemos obtenido depósitos sobre sustratos de cuarzo y Cu que se encuentran en estos momentos en fase de análisis mediante diferentes técnicas (XPS, Raman, TEM y SEM) en los Laboratorios de Praga.

#### **- Procesos fotoquímicos de deposición de fases nanométricas.**

También en colaboración con el Grupo del Prof. J. Pola del Instituto de Procesos Físico-Químicos Fundamentales de Praga (República Checa) hemos completado el estudio de los sistemas formados por dimetilselenio como molécula precursora de los átomos de Se y el trisilano ó 1,3-disilaciclobutano como precursores de la matriz polimérica. Mediante LIF hemos comprobado la formación en la fase gaseosa de las reacciones de la especie SiSe. Las características de los depósitos resultantes se han estudiado mediante FTIR, Raman, XPS y microscopías electrónicas de transmisión y barrido. Estos estudios demuestran de foma indirecta 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.

Hemos estudiado, por otra parte, el sistema formado por tiirano ( $C_2H_4S$ ), como precursor de átomos de azufre, y trisilano ( $Si_3H_8$ ) como fuente de la matriz polimérica. En este caso hemos comprobado mediante LIF la formación en fase gaseosa de la especie SiS a través de dos de sus sistemas de bandas. Este resultado junto con los obtenidos mediante análisis por GC/MS y por espectroscopía FTIR *in situ* ha permitido determinar los canales de disociación que tienen lugar en este sistema.

### - Espectroscopía de plasma inducido por láser (Laser Induced Breakdown Spectroscopy, LIBS).

La espectroscopía de plasma inducido mediante láser (LIBS) es un método fácil y rápido para el análisis espectroscópico (OES) de sólidos, líquidos o gases. En colaboración con el Prof. J. J. Camacho del Departamento de Físico-Química de la UA de Madrid hemos llevado a cabo estudios espectroscópicos detallados de moléculas gaseosas de interés induciendo el *breakdown* mediante nuestros láseres de CO<sub>2</sub>. En particular, hemos obtenido el espectro del plasma generado en N<sub>2</sub> y en Si<sub>3</sub>H<sub>8</sub>. En ambos casos se han identificado las líneas obtenidas y se han determinado las temperaturas de excitación suponiendo equilibrio termodinámico local. A partir de nuestras observaciones experimentales hemos sugerido que el principal mecanismo responsable de creación de la ruptura o *breakdown* en ambas especies es la formación de cascada electrónica.

## 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 precrystalización, cristalización y transiciones de fase en polímeros sintéticos y naturales.
- Síntesis de poliolefinas funcionalizadas.
- Estudio de las reacciones de polimerización mediante cálculos mecano-cuánticos.
- Simulación jerarquizada de dinámica macromolecular.
- Nuevas poliolefinas con arquitectura controlada: estructura y propiedades.
- Dinámica molecular y propiedades viscoelásticas.
- Procesos de extrusión en mezclas de poliolefinas.
- Dinámica molecular y propiedades dieléctricas.
- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.
- Biofísica.

### TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

## LABOR INVESTIGADORA (Por Grupos)

### □ Grupo de Estructura Molecular y Propiedades de Polímeros.

#### - Estudio de las propiedades físicas de modelos moleculares: estructura del catalizador y topología molecular (proyecto COMOCOMO).

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

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

Alternativamente a la tecnología de los catalizadores de metaloceno, se han desarrollado en los últimos años otro tipo de catalizadores, derivados de  $\alpha$ -diiminas de Ni and Pd, que suponen otra ruta para la obtención de polímeros ramificados sin la necesidad de la adición de comonómeros, y que también pueden incorporar ramificaciones de cadena larga. Con catalizadores de Ni se han obtenido PE con diferente densidad de ramificaciones cortas (desde metilo hasta hexilo). Los catalizadores de Pd pueden controlar la topología de las cadenas, de manera que se obtienen tanto estructuras con muy pocas ramificaciones de cadena larga como estructuras hiper-ramificadas o dendríticas. La colaboración con la Universidad de Sevilla se ha centrado en el estudio de este tipo de materiales y en la posibilidad de copolimerizar etileno con monómeros polares como el acrilato de metilo. El introducir de manera precisa en las poliolefinas grupos polares y funcionales está atrayendo considerable atención, ya que puede dar lugar a propiedades específicas como mejora de la procesabilidad, adhesión y compatibilidad con otros materiales, e incluso, con sistemas biológicos.

#### - Simulación Monte Carlo del efecto de la ramificación de cadena corta en poliolefinas en el estado fundido (proyecto CICYT MAT2006-0400).

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

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

**- Simulación y experimentos para la obtención del tiempo de relajación de enmarañamientos en polietileno (proyecto CICYT MAT2006-0400).**

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

**- Simulación estocástica de los procesos de nucleación tempranos en polietileno (proyecto CICYT MAT2006-0400).**

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

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

**- Estudio de la relación entre la estructura del catalizador y la arquitectura molecular de copolímeros polares (proyecto CICYT MAT2006-0400).**

Con el apoyo de las investigaciones que se realizan en el Grupo acerca de la simulación por ordenador de la habilidad de los catalizadores de centro activo único para generar poliolefinas de arquitectura controlada, y mediante la síntesis de nuevos materiales (a través de la cooperación con Repsol-YPF), se ha estudiado la relación entre la arquitectura molecular y las propiedades de los polímeros obtenidos mediante los catalizadores [*rac*-ethylene(Ind)<sub>2</sub>ZrCl<sub>2</sub>], [*rac*-ethylene(H<sub>4</sub>Ind)<sub>2</sub>ZrCl<sub>2</sub>], y [norbornane(Ind)<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>]. Los resultados de este trabajo indican claramente que la estructura del catalizador desempeña un papel importantísimo en la copolimerización (actividad y habilidad para incorporar comonomeros). Para ambientes estéricos similares alrededor del centro metálico del catalizador, un cambio en las características electrónicas de los ligandos produce importantes variaciones en la inserción del comonomero polar. Cuando la estructura química de los complejos catalíticos es la misma, la disposición de los ligandos (meso *versus* rac) puede provocar que las especies sean activas o no en presencia del comonomero. Además la longitud del puente (uno o dos átomos de carbono) y el tipo de metal (zirconio o titanio) modula la capacidad del catalizador para polimerizar. La longitud del comonomero tiene también su papel, ya que mayores comonomeros se incorporan más fácilmente en la cadena en crecimiento. En cualquier caso, los precursores de zirconoceno se han manifestado como los más interesantes para obtener copolímeros de etileno/alcohol, con incorporaciones de hasta el 25 % en peso, raramente observada en la literatura.

En cuanto al desarrollo de nuevos materiales bimodales procesables y con propiedades específicas se han estudiado diversas familias de polietilenos, obtenidos mediante un novedoso proceso de catálisis dual que supone el uso de una mezcla de sistemas catalíticos: un catalizador metalocénico, que polimeriza, en principio, cadenas de etileno y  $\alpha$ -olefinas de alto peso molecular, y un catalizador post-metaloceno, que genera especies etilénicas lineales de bajo peso molecular. El objetivo es generar ambas especies moleculares en un mismo reactor, de manera que ambas se encuentran íntimamente mezcladas, con lo que no es necesario el proceso ulterior de mezclado (habitual en los procesos industriales para generar este tipo de materiales). Los resultados ponen de manifiesto la posibilidad de generar una gran variedad de materiales

(de distinta densidad, cristalinidad y módulo elástico) a través de la variación de la proporción de las especies catalíticas en el proceso de polimerización. Se ha observado, sin embargo, que los materiales presentan arquitecturas moleculares muy complejas, que derivan finalmente en problemas de procesado, y que probablemente se deben a un efecto “tandem”. Este fenómeno implica que las especies de bajo peso molecular generadas por la especie post-metalocénica se incorporan al proceso de polimerización en los centros activos metalocénicos, dando lugar a estructuras ramificadas extremadamente complejas. El siguiente paso será el estudio de las variables de polimerización que eviten la presencia de este tipo de estructuras, que, como se ha comentado en líneas anteriores, se deben fundamentalmente a la estructura del catalizador utilizado.

#### **- Propiedades de sistemas compuestos de poliolefina y nanotubos de carbono (colaboración USB).**

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

#### **- Análisis de la reactividad de catalizadores postmetalocénicos como catalizadores para polimerización de olefinas (proyecto de cooperación hispano-chileno 2006-2007).**

Los catalizadores basados en complejos de hierro con ligandos bis(imino)piridina han demostrado un excelente rendimiento en la polimerización de olefinas. Sin embargo, existe una amplia controversia acerca de la naturaleza de la especie activa responsable del proceso catalítico. Una de las más vivas polémicas surge en la asignación del estado de oxidación de la especie activa, reportándose unos experimentos que indican un estado de oxidación 3 para el hierro y otros que indican un estado de oxidación 2 para dicho metal.

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

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

Se ha continuado con la colaboración con la industria, concretamente con dos empresas del sector de los materiales poliméricos: Dow Chemicals y Repsol-YPF. En este contexto se han desarrollado actividades de investigación para la transferencia de conocimiento en el desarrollo de nuevos materiales de base olefínica con propiedades específicas, en las que han estado involucrados dos estudiantes de post-grado (Jon Otegui de la Fuente y Nuria Robledo 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 estudio de sistemas poliméricos formados por dos especies moleculares distintas obtenidas en un único reactor, en contraposición a los modelos estudiados con anterioridad y que estaban constituidos por mezclas físicas de ambos componentes; y por otro desde el estudio de mezclas de polímeros de distinta arquitectura molecular con objeto de ajustar determinadas propiedades, muy dependientes de la interacción entre los componentes de la mezcla, y que son clave en la producción de películas finas.

### **- Estudios mecanísticos sobre catalizadores metalocénicos.**

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

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

### □ **Grupo de Física de la Materia Blanda y Polimérica.**

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

Hemos continuado la línea de investigación experimental encaminada a obtener tanto información estructural, mediante difracción de rayos X, como dinámica, mediante espectroscopía dieléctrica, de forma simultánea durante procesos de ordenamiento en polímeros. Para la realización de estos experimentos hemos hecho uso de luz sincrotrón en el “Deutsches Elektronen Synchrotron” (DESY) de Hamburgo, Alemania y del “European Radiation Synchrotron Facility (ESRF)” de Grenoble, Francia. En particular hemos investigado el ordenamiento cristalino en muestras de polipropileno adipato (PPA) y polipropileno succinato (PPS) en un amplio espectro de frecuencias. Los resultados obtenidos han contribuido a esclarecer el mecanismo de nucleación cristalina en materiales poliméricos.

#### **- 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.

#### **- Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.**

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

#### **- Dinámica molecular en sistemas amorfos.**

En colaboración con la Dra. Nadia Lotti, de la Universidad de Bolonia (Italia), se ha continuado con la investigación sobre la dinámica molecular en materiales amorfos mediante la técnica de espectroscopía dieléctrica de banda ancha. En este aspecto se han estudiado, entre otras, las relajaciones por debajo y por

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

#### **- Materiales poliméricos con propiedades avanzadas.**

Dentro de este capítulo y 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), nuestro Grupo 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. En particular hemos sido capaces de preparar películas delgadas de estos materiales (*nanofilms*) mediante la técnica de recubrimiento en giro (*spin-coating*). Tanto las medidas realizadas mediante difracción de rayos X en incidencia rasante (GISAXS) como por microscopía de fuerza atómica (AFM) revelan que es posible mantener un apilamiento discótico incluso para espesores en torno a los 10 nm.

#### **- Biofísica: conformación de la proteína de membrana Integrina $\alpha 2\beta 3$ .**

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

#### **- Transferencia Tecnológica: nuevos materiales poliméricos conductores basados en nanofibras de carbono.**

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

#### **□ Grupo de Propiedades Físicas y Nanoestructura de Polímeros.**

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

Se ha investigado la diferente nanoestructura que se genera cuando el politereftalato de etilo (PET) se cristaliza desde el estado vítreo a partir de material amorfo deformado uniaxialmente a temperatura ambiente (25°C) y a una temperatura por encima de la transición vítrea (90°C). Los estudios de difracción de rayos-X a ángulos grandes y pequeños (WAXS y SAXS respectivamente) sugieren que la inclinación del eje *c* cristalográfico y aquella de las laminillas guardan una relación suplementaria. Se ha observado

que cuando el material se cristaliza a partir de PET vítreo deformado a 25°C, cuya orientación molecular es muy acusada, sólo se aprecia una pequeña inclinación del eje molecular  $c$  y, en cambio, la inclinación de los empaquetamientos cristalinos es muy significativa. Por otro lado, el PET vítreo deformado a 90°C y posteriormente cristalizado presenta un ángulo de inclinación del eje  $c$  muy importante, debido a la menor orientación molecular del material antes de ser sometido al proceso de cristalización. En este caso, no se aprecia inclinación de la superficie de las laminillas cristalinas. La diferente nanoestructura encontrada para el material deformado por debajo y por encima de la temperatura de transición vítrea ha sido correlacionada con sus propiedades micro-mecánicas, encontrándose que en el primer caso la anisotropía mecánica es muy acusada, y en el segundo, el material presenta una respuesta isotrópica a la deformación mecánica local.

#### **- Procesos de recristalización en sistemas semi-rígidos.**

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

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

Estudios de análisis térmico dinamo-mecánico (DMTA) llevados a cabo en PET orientado, cristalizado a temperaturas bajas (100–140°C) desde el estado vítreo, muestran un espectro de relajación desplazado a temperaturas más altas respecto al del material sin cristalizar. Además, el espectro del material cristalizado se extiende decenas de grados por encima de la temperatura de cristalización. Este resultado sugiere que durante el curso de la cristalización, el material amorfo sufre un proceso que resulta en una mejora de sus propiedades mecánicas. Dicho proceso podría estar asociado a una “vitrificación” de las regiones amorfas entre cristales, o de las fracciones de material amorfo adyacente a los cristales. Esta fracción de material amorfo, de rigidez superior al material amorfo “móvil”, se denomina comúnmente fase amorfa rígida. Se ha desarrollado un modelo que utiliza herramientas de la mecánica estadística para describir este posible mecanismo de vitrificación que tendría lugar en las regiones amorfas entre cristales durante el proceso de cristalización. Además, se han empleado parámetros estructurales derivados de SAXS para comprobar la validez de este modelo.

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

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

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

Se ha investigado asimismo la cinética de cristalización en materiales multilaminares de PET/PC (50/50) con espesores de lámina entre los 10 y los 1000 nm, mediante medidas simultáneas de SAXS y WAXS.

Los resultados preliminares obtenidos no muestran diferencias significativas entre la cinética de cristalización de los distintos materiales.

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

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

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



**CAPÍTULO 3**  
**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN**



### **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: MEC.

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: 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: MEC.

Investigador Principal: Guillermo Antonio 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.

#### **Acción EXPLORA: construcción de teorías de gravedad cuántica desde modelos análogos.**

Código o Referencia: FIS2006-26387-E.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Luis Garay Elizondo.

Periodo: enero 2007-marzo 2008.

Objetivos: Estudio de teorías de gravedad emergente y mecanismos de generación de regímenes gravitatorios cuánticos a partir de modelos análogos en materia condensada.

#### **Programa CONSOLIDER: Centro Nacional de Física de Partículas, Astropartículas y Nuclear.**

Código o Referencia: CSD2007-00042.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Antonio Pich Zardoya/Con participación del Grupo de Física Gravitacional del IEM.

Periodo: enero 2007-diciembre 2011.

Objetivos: Desarrollo en España de la física de partículas, astropartículas, nuclear y teórica y creación de un centro nacional destinado a estas temáticas.

### **3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

#### **Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS.**

Código o Referencia: MAT2005-24500-E.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2006-2007.

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

#### **Contribución española a la segunda estación de blanco de ISIS.**

Código o Referencia: MAT2005-24500-E.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2007-2008.

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

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

Código o Referencia: IN2P3.

Entidad Financiadora: CICYT.

Investigador Principal: Jorge Dukelsky Bercovich.

Periodo: 2006-2008.

Objetivos: Desarrollo de modelos integrables basados en álgebra de Gaudin para el estudio de Estructura Nuclear y aplicación del grupo de renormalización de la matriz densidad a núcleos débilmente ligados.

**Modelos exactamente solubles y cálculos de gran escala en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.**

Código o Referencia: FIS2006-12783-C03-01.

Entidad Financiadora: DGI.

Investigador Principal: Jorge Dukelsky Bercovich.

Periodo: 2006-2009.

Objetivos: Desarrollo de métodos numéricos y analíticos exactos para el tratamiento de sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Estudio de la competencia entre integrabilidad y caos en regiones críticas o transicionales. Desarrollo de nuevos algoritmos del grupo de renormalización de la matriz densidad para el estudio de sistemas fuertemente correlacionados.

**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<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.

Periodo: mayo 2006-abril 2007.

Objetivos: La subvención de un técnico superior para terminar la instalación de la línea de Física Nuclear en el CMAM, en particular su automatización y el control remoto de las válvulas de la línea. Además, participar en los experimentos realizados en dicha línea dedicados a reacciones nucleares de interés astrofísico y a testear detectores de partículas cargadas para el proyecto europeo EURONS y para I+D para FAIR.

**Estudio de la emisión de partículas tras la desintegración beta.**

Código o Referencia: IN2P3 06-08.

Entidad Financiadora: CICYT.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge/Bertram Blank (CENBG, CNRS, Francia).

Periodo: 10 julio 2006-9 julio 2007.

Objetivos: Estudio de la emisión de protones en los isótopos de argón deficientes en neutrones. Artículo de revisión sobre los núcleos emisores de partículas cargadas y su repercusión.

**Dinámica, estructura y modos de desintegración de núcleos exóticos ligeros.**

Código o Referencia: FPA2005-02379.

Entidad Financiadora: CICYT.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.

Periodo: 31 diciembre 2005-30 abril 2008.

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

**Contribución al experimento ISOLDE del CERN.**

Código o Referencia: FPA2005-25345-E.

Entidad Financiadora: CICYT.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.

Periodo: julio 2006-julio 2007.

Objetivos: Pago de la contribución española a la instalación ISOLDE y subvención de los viajes del representante español en las reuniones de la colaboración.

**Contribución al experimento ISOLDE del CERN**

Código o Referencia: CAC 2007-11.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.

Periodo: diciembre 2007-diciembre 2009.

Objetivos: Pago de la contribución española a la instalación ISOLDE y subvención de los viajes del representante español en las reuniones de la colaboración.

### **Simulaciones para el desarrollo de un espectrómetro gamma para el experimento R<sup>3</sup>B de FAIR.**

Código o Referencia: AECI A/6248/06.

Entidad Financiadora: MAE.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge/Tarek El Bardouni (Fac. des Sciences, Tetuán, Marruecos).

Periodo: diciembre 2006-diciembre 2007.

Objetivos: Contribuir al diseño, puesta a punto y evaluación de la respuesta del calorímetro de absorción total "CALIFA" para el experimento R<sup>3</sup>B. El objetivo de la colaboración entre el IEM del CSIC y el ERSN de Tetuán (Marruecos) es comparar las simulaciones de GEANT4 utilizadas en el IEM con un código Monte Carlo de múltiples partículas, MCNPX para conocer la respuesta de un detector *phoswich* compuesto de dos centelladores de nueva generación.

### **Estructura y reacciones con núcleos exóticos.**

Código o Referencia: FIS2005-00640.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Pedro Sarriguren Suquilbide.

Periodo: 31 diciembre 2005-31 diciembre 2008.

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

### **EUROpean Nuclear Structure Integrated Infrastructure Initiative (EURONS).**

Código o Referencia: EU Contract n° 506065.

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

Investigador Principal: Olof E. Tengblad.

Periodo: enero 2005-diciembre 2008.

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

### **Desarrollo de detectores para experimentos de Astrofísica.**

Código o Referencia: 2005GB0081.

Entidad Financiadora: CSIC-The Royal Society UK.

Investigador Principal: Olof E. Tengblad.

Periodo: enero 2006-diciembre 2007.

Objetivos: Desarrollar detectores y electrónica y llevar a cabo experimentos de reacciones a baja energía de interés astrofísico y para estudios de Estructura Nuclear.

### **Dinámica y estructura de núcleos exóticos ligeros. Prototipo de doble cristal para el calorímetro CALIFA del experimento R<sup>3</sup>B en FAIR.**

Código o Referencia: CICYT FPA2007-62170.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Olof E. Tengblad.

Periodo: 1 octubre 2007-30 septiembre 2009.

Objetivos: Caracterización de la estructura de núcleos ligeros exóticos mediante estudios de desintegración beta y reacciones. Se harán estudios de dispersión a energías bajas, próximas a la barrera coulombiana y a energías relativistas. Además se trabajará en el desarrollo, construcción y testado de un prototipo para la parte delantera del calorímetro CALIFA (CALorimeter for In-Flight gamma detection) que rodea al blanco de R<sup>3</sup>B@FAIR. Con este prototipo se estudiará el rendimiento de detectores formados por cristales *phoswich* (dos cristales centelladores de distinta composición) para la detección de protones y gammas de alta energía, su resolución energética, y su capacidad de identificación individual.

### **Correlaciones espacio-temporales a nanoescalas: efectos de heterogeneidad, desorden y confinamiento.**

Código o Referencia: MAT2007-65711-C04-01.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Carlos Cabrillo García.

Periodo: 2007-2010.

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

### **Dinámica cuántica de sistemas fuertemente correlacionados.**

Código o Referencia: 200650M012.

Entidad Financiadora: CAM-CSIC.

Investigador Principal: Rafael Alejandro Molina Fernández.

Periodo: enero 2007-diciembre 2007.

Objetivos: Estudio de la dinámica cuántica y la decoherencia en sistemas unidimensionales fuertemente correlacionados de átomos de gases ultrafríos en redes ópticas y de cadenas de espín.

#### **Materiales y actuadores aplicados a estructuras y procesos inteligentes.**

Código o Referencia: ACTMAT.

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco.

Investigador Principal: J. M. Barandiarán. Colaborador del IEM: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2006-2008.

Objetivos: Desarrollo de dispositivos basados en materiales con memoria de forma.

### **PROYECTOS CON LA INDUSTRIA**

#### **Desarrollo de inyectores de potencia para aceleradores de protones de última generación.**

Código o Referencia: FETS.

Entidad Financiadora: CDTI, programa nacional del espacio.

Investigador Principal: Francisco Javier Bermejo Barrera.

Periodo: 2007-2011.

Objetivos: Diseño y construcción de banco de pruebas para el desarrollo de la próxima generación de aceleradores de protones de alta potencia.

### **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 o de combustión.**

Código o Referencia: FIS2005-02029.

Entidad Financiadora: MCYT.

Investigador Principal: Dionisio Bermejo Plaza.

Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.

Objetivos: 1. Desarrollo de una nueva técnica espectroscópica para medir tasas de transferencia de energía rotacional estado a estado en gases. 2. Medidas de los efectos de las colisiones sobre el espectro Raman inverso de las mismas moléculas.

#### **Pulsed Laser Source in NIR for LIDAR Applications.**

Código o Referencia: AO/1-4724/05/NL/IA.

Empresa Financiadora: Office National d'Etude et de Recherches Aérospatiales (ONERA, France).

Investigador Principal: Dionisio Bermejo Plaza.

Periodo: abril 2006-agosto 2007.

Objetivos: Diseño y construcción de un prototipo de unidad de conversión de frecuencia basada en desplazamiento Raman.

#### **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: MEC.

Investigador Principal: Rafael Escribano Torres.

Periodo: abril 2005-mayo 2008.

Objetivos: 1. Formación de cristales de hielo de composición múltiple. Obtención de los espectros de infrarrojo de estos sistemas. 2. Construcción de una célula de flujo para generación de aerosoles atmosféricos. 3. Estudio teórico de la estructura de los sistemas mencionados, incluyendo las superficies más adecuadas para la adsorción de moléculas gaseosas, y predicción de los espectros de infrarrojo de los correspondientes cristales. 4. Generación de plasmas fríos de aire a bajas presiones y estudio espectrométrico de las especies formadas, de interés en la cinética de las capas inferiores (D y E) de la ionosfera. 5. Simulación teórica de los resultados obtenidos mediante modelos cinéticos.

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

Código o Referencia: 200550F0051.

Entidad Financiadora: CSIC (Proyecto Intramural del Frontera PIF).

Investigador Principal: Rafael Escribano Torres, I.P. del PIF: Claro Ignacio Sainz Díaz (Insto. Andaluz de Ciencias de la Tierra).

Periodo: noviembre 2005-octubre 2007.

Objetivos: Aclarar cuestiones relacionadas con las propiedades cristalinas, morfológicas y espectroscópicas de los hielos de relevancia atmosférica mediante investigaciones experimentales y teóricas.

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

Código o Referencia: FIS2004-02576.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Salvador Montero Martín.

Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.

Objetivos: Estudio experimental de la producción y detección de *clusters* pequeños de hidrógeno, hasta cien moléculas, la determinación de su estructura y el establecimiento de su cinética.

**Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).**

Código o Referencia: S-0505/TIC-0191, Subproyecto IEM.

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid.

Investigador Principal: Concepción Domingo Maroto (IP del proyecto: Fernando Cussó, UAM).

Periodo: enero 2006-diciembre 2008.

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

**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: MEC.

Investigador Principal: Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.

Periodo: 1 octubre 2006-30 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.

**Study of Tritium Removal from Macrobrush Structures by Oxidative Methods.**

Convenio CIEMAT-CSIC en el Marco del Programa Tecnológico de EFDA (European Fusion Development Agreement).

Investigador Principal: Isabel Tanarro Onrubia.

Periodo: noviembre 2007-diciembre 2007.

Objetivos: Determinación de la eficiencia de eliminación de películas carbonadas mediante métodos de oxidación, en condiciones geométricas análogas a las estructuras de bloques “en cepillo” de ITER.

**Astroquímica en el laboratorio: contribución al satélite HERSCHEL.**

Código o Referencia: ESP2004-21060-E.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: José M<sup>a</sup> Fernández Sánchez.

Periodo: enero 2006-marzo 2007.

Objetivos: Equipar el laboratorio de Fluidodinámica Molecular del IEM para realizar medidas de alto valor en astroquímica interestelar, de cara a la explotación óptima de las observaciones del satélite HERSCHEL.

**Estudio experimental y teórico de colisiones moleculares de interés en Astrofísica y Física Atmosférica.**

Código o Referencia: HF2004-0232.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: José M<sup>a</sup> Fernández Sánchez.

Periodo: enero 2005-marzo 2007.

Objetivos: Determinación, tanto experimental como teórica, de tasas de transferencia nivel-a-nivel y coeficientes de ensanchamiento de líneas espectrales de los sistemas  $N_2:N_2$ ,  $N_2:He$ ,  $H_2:H_2$ ,  $H_2:He$  a bajas temperaturas.

**Colisiones moleculares de interés astrofísico y atmosférico.**

Código o Referencia: FIS2007-61430.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: José M<sup>a</sup> Fernández Sánchez.

Periodo: octubre 2007-octubre 2010.

Objetivos: Estudio a escala molecular de las colisiones inelásticas de  $CO$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$  con  $H_2$  y  $He$  para medir los coeficientes de transferencia nivel-a-nivel a bajas temperaturas.

**Control cuántico molecular: aplicaciones de interés tecnológico.**

Código o Referencia: FIS2004-02558.

Entidad Financiadora: MEC.

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.

**Control cuántico de moléculas adsorbidas en superficies.**

Código o Referencia: Acción Integrada con Hungría HH2006-0023.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Juan Ortigoso Martínez.

Periodo: enero 2007-diciembre 2008.

Objetivos: Diseño de estrategias para el control de la orientación de moléculas adsorbidas en superficies metálicas mediante métodos desarrollados previamente para el control de procesos en fase gaseosa.

**ASTROCAM. Red de Astrofísica de la Comunidad de Madrid.**

Código o Referencia: S-0505-ESP-000237.

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.

Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla/Investigadores participantes del Dpto. FM Salvador Montero Martín, José M. Fernández Sánchez, Guzmán Tejada Gala.

Periodo: enero 2006-diciembre 2009.

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

### **3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**ASTROCAM.**

Código o Referencia: CAM, S-0505 ESP0237.

Entidad Financiadora: CAM.

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: MCYT-MEC.

Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.

Periodo: 2003-2006, prorrogado hasta 31 diciembre 2007.

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: 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: Comunidad Europea.

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: MEC.

Investigador Principal: José Cernicharo Quintanilla.

Periodo: 2007-2009.

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

Código o Referencia: ESP2004-00665.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.

Período: 2005-2007.

Objetivos: Desarrollo de software para el análisis de de los datos de HIFI (Herschel) y explotación científica del HIFI.

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

Código o Referencia: ESP2007-65812-C02-01.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Jesús Martín-Pintado Martín.

Período: 2007-2010.

Objetivos: Desarrollo de software para el análisis de de los datos de HIFI (Herschel) y explotación científica del HIFI.

**Execution of Laboratory Calibration Tests for the ALMA Calibration System.**

Código Referencia: N° Registro OTT 20071081.

Entidad financiadora: ESO.

Investigador Principal: Jesús Martín Pintado Martín.

Período: 2007-2008.

Objetivos: Caracterización de la láminas semitransparentes del sistema de calibración de amplitudes de ALMA.

**Participación española en el telescopio espacial James Webb y proyectos científicos asociados.**

Código o Referencia: ESP2007-65475-C02-01.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Santiago Arribas Mocoroa.

Período: 2007-2010.

Objetivos: Participación en las fases de calibración y preparación de los programas científicos de los instrumentos NIRspec y MIRI.

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

Código o Referencia: ESP2005-01480.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Luis Colina Robledo.

Período: 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: MEC.

Investigador Principal: Luis Colina Robledo.

Período: 2006-2007.

Objetivos: Medidas de alta precisión en condiciones de alto vacío y temperaturas criogénicas (35 K) 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: Luis Colina Robledo (IEM), I.P.: J. Gallego.

Período: 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: AYA2005-00702.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> Luisa Senent Díez.

Período: 2005-2008.

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.

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

Código o Referencia: PIE 2006-501082.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> 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.

**Estudios teóricos de reacciones de interés atmosférico: el papel de los átomos metálicos en la descomposición del ozono.**

Código o Referencia: A/5107/06.

Entidad Financiadora: AECL.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> Luisa Senent Díez/Jaïdane Nejmeddine (Túnez).

Periodo: 2007.

Objetivos: Estudios teóricos de reacciones de interés atmosférico.

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

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

Entidad Financiadora: MCYT.

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: MEC.

Investigador Principal: Francisco Najarro de la Parra.

Periodo: septiembre 2006-agosto 2007.

Objetivos: Estudio de la contribución española a SPICA.

**Development of Software for the Atacama Large Millimeter Array (ALMA).**

Código o Referencia: N<sup>o</sup> Registro OTT 20071080.

Entidad Financiadora: ESO.

Investigador Principal: Juan Ramón Pardo Carrión.

Periodo: 2007-2011.

Objetivos: Mantenimiento y mejoras del paquete de programas ATM para el proyecto ALMA.

**Estudio físico-químico de la transición estelar desde la fase de gigante roja a la de nebulosa planetaria.**

Código o Referencia: PIE REF 200750I024.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Juan Ramón Pardo Carrión.

Periodo: 2007-2011.

**Formación y evolución de proto-nebulosas planetarias.**

Código o Referencia: PIE 200750I028.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Carmen Sánchez Contreras.

Periodo: agosto 2007-diciembre 2008.

Objetivos: Estudio de la formación y evolución circumestelar post-AGB en el óptico, infrarrojo y milimétrico.

**Data Analysis of IR Emission from Active Galactic Nuclei.**

Código o Referencia: ADP NNG04GC83G.

Entidad Financiadora: NASA.

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

Periodo: 2004-2007.

Objetivos: Interpretación de observaciones de AGNs.

### **The Most Massive Stars**

Código o Referencia: LTSA04-0000-0008.

Entidad Financiadora: NASA (con participación del IEM).

Investigador Principal: D. Figer.

Periodo: 2004-2007.

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

### **Aplicaciones del método de tensores irreducibles del oscilador armónico (hot) y potenciales moleculares modelo en Química Cuántica.**

Código o Referencia: A/5107/06.

Entidad Financiadora: FONDECYT (Chile).

Investigador Principal: J. R. Letelier (con participación del IEM).

Periodo: 2007.

Objetivos: Programación de códigos en Fortran para Espectroscopía.

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

Código o Referencia: PBI-05-009.

Entidad Financiadora: Consejería de Ecuación y Ciencia de la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha.

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

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: CSD2006-00070.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: José Miguel Rodríguez Espinosa (con participación del IEM).

Periodo: 2006-2011.

Objetivos: Preparación y explotación del GTC.

### **Espectroscopía de moléculas no-rígidas.**

Código o Referencia: 58728, CoNaCYT.

Entidad Financiadora: Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México.

Investigador Principal: M. Villa (con participación del IEM).

Periodo: 2007-2008.

Objetivos: Estudio de la molécula de propano.

## **3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

### **Espectroscopía de correlación bidimensional infrarroja y Raman de biomoléculas.**

Código o Referencia: CTQ2006- 04161/BQU.

Entidad Financiadora: MEC.

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.

### **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: MEC.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: enero 2005-mayo 2008.

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.

**Nanosensores moleculares basados en plasmones superficiales localizados: SERS, SEIRA y SEF.**

Código o Referencia: FIS2007-63065.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: octubre 2007-agosto 2010.

Objetivos: Detección de compuestos de interés medioambiental o pigmentos de interés artístico a nivel de trazas o moléculas aisladas mediante el empleo de nanopartículas metálicas adecuadamente funcionalizadas.

**Cultural Heritage.**

Código o Referencia: FP6-513915.

Entidad Financiadora: Comunidad Europea (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.

Entidad Financiadora: Proyecto Intramural de Frontera del CSIC.

Investigador Principal: José Vicente García Ramos.

Periodo: 2006-2008.

Objetivo: Aplicación de técnicas espectroscópicas vibracionales y electrónicas al estudio de la conservación del Patrimonio Histórico-Artístico referente al arte rupestre.

**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 2007.

Objetivos: Funcionalización de superficies metálicas nanoestructuradas mediante moléculas biológicas para la detección de contaminantes y fármacos antitumorales fotoactivos.

**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 sensibles y selectivos para la detección de contaminantes tipo policíclicos aromáticos y pesticidas.

**Interaction of Antiviral and Anticancer Photosensitizer Hypericin with Liposomes and Low-Density Lipoproteins by a New Combined Surface-Enhanced Raman and Fluorescence Method.**

Código o Referencia: 2007SK0002.

Entidad Financiadora: Acuerdo CSIC-Academia de Ciencias Eslovaca.

Investigador Principal: Santiago Sánchez Cortés.

Periodo: 2008-2009.

Objetivos: Estudio de la agregación e interacción con biomoléculas de fármacos antitumorales con estructura antraquinónica.

**Fotónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas.**

Código o Referencia: FIS2006-07894.

Entidad Financiadora: MEC.

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.

**Reacciones inducidas por láseres de IR para la deposición de materiales nanoestructurados.**

Código o Referencia: 2006CZ00015.

Entidad Financiadora: CSIC y Academia de Ciencias Checa.

Investigador Principal: Luis Díaz Sol/José Pola (Rep. Checa).

Periodo: enero 2007-diciembre 2008.

Objetivos: Estudio de la deposición inducida por láser de algunos calcogenuros de silicio y materiales carbonáceos nanoestructurados.

#### **Quality Seafood for Improved Consumer Health and Well-Being. SEAFOODplus.**

Código o Referencia: FP6-506359.

Entidad Financiadora: Unión Europea (VI Programa Marco).

Coordinador: Torger Borrensen. Danish Institute for Fisheries Research (DIFRES), Dinamarca (con participación del IEM).

Periodo: 2004-2008.

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

#### **Química física de plasmas de ablación y disociación láser para la deposición de nanoestructuras.**

Código o Referencia: CTQ2007-60177/BQU.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Marta Castillejo Striano (con participación del IEM).

Periodo: octubre 2007-septiembre 2009.

Objetivos: Investigación de la reactividad en fase gas de las especies presentes en la pluma de ablación y en plasmas de fotodisociación.

#### **Microdispositivos ópticos sensores (MICROSERES).**

Código o Referencia: S-0505/TIC-019.

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid.

Investigador Principal: Fernando Cussó (con participación del Dpto.).

Periodo: enero 2006-diciembre 2008.

Objetivos: Aplicación de sistemas óptico-electrónicos nano-estructurados para la detección de contaminantes.

### **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: MEC.

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: Comunidad Europea/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.

#### **Study of Polymer Nanostructures under Confinement as Revealed by WAXS, SAXS and USAXS.**

Código o Referencia: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20070031.

Entidad Financiadora: Comunidad Europea.

Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.

Periodo: 2007-2009.

Objetivos: Estudios estructurales de sistemas multilaminares mediante radiación sincrotrón de rayos X.

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

Código o Referencia: MAT2006-0400.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascañana.

Periodo: 2006-2009.

Objetivos: Estudio de las propiedades físico-químicas de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas básicos en la física de polímeros y diseño de nuevos materiales con arquitectura controlada.

**Construcción molecular mediante procesos catalizados por complejos organometálicos.**

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

Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascañana y Víctor Cruz Cañas (IEM); I.P.: Pascual Royo García (Universidad de Alcalá).

Objetivos: Aunar la experiencia de grupos líderes en la CAM orientando el esfuerzo al desarrollo de nuevos catalizadores organometálicos en diferentes aplicaciones. El subproyecto del IEM se centra en nuevas poliolefinas soportadas en las 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: MEC.

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.

**Structuring Polymers COST-P12.**

Código o Referencia: COST-P12.

Entidad Financiadora: Comunidad Europea.

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.

**Carbon Nanotubes as Potential Templates for Polymer Crystallization in Bulk and in Thin Film Materials.**

Código o Referencia: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20060160.

Entidad Financiadora: Comunidad Europea.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: enero 2007-diciembre 2009.

Objetivos: Investigación de las posibilidades de nanoplantillas poliméricas con y sin nanotubos de carbono como superficies funcionales activas en la producción de nanoestructuras poliméricas con arquitectura controlada.

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

Código o Referencia: FIS2007-60534.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: Fernando Ania García.

Periodo: noviembre 2007-noviembre 2010.

Objetivos: Estudio de sistemas nanoestructurados compuestos por un apilamiento alternante de finas láminas de polímeros inmiscibles desde el punto de vista, tanto de su nanoestructura laminar, como de los cambios que ésta provoca en sus propiedades físicas cuando el espesor de los estratos se hace menor de un valor crítico (confinamiento físico).

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

Código o Referencia: MAT2004-05865.

Entidad Financiadora: MEC.

Investigador Principal: M<sup>a</sup> 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 nanoorden y las propiedades finales del material.

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

Código o Referencia: 2005CL0049.

Entidad Financiadora: CSIC.

Investigador Principal: Víctor Cruz Cañas.

Periodo: 2006-2007.

Objetivos: Elucidación de los factores determinantes de la reactividad de catalizadores de centro activo único mediante modelos teóricos provenientes de la Teoría de Funcionales de la Densidad.

### **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 Bascuñana y Juan Fco. Vega Borrego.

Periodo: 2006-2008.

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

#### **Caracterización de polímeros bimodales a partir de sus componentes.**

Empresa: Repsol-YPF.

Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Juan Fco. Vega Borrego.

Periodo: 2007-2008.

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

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

Código o Referencia: II (EU 3433-APOLYNAIRE).

Empresa: Grupo Antolín-Ingeniería, S.A.

Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Periodo: enero 2007-diciembre 2007.

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



**CAPÍTULO 4**  
**COOPERACIÓN CIENTÍFICA**



## **4.1 CONGRESOS Y REUNIONES NACIONALES**

(Subrayado el nombre del ponente).

### **4.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

**1<sup>er</sup> Encuentro de Investigadores del Grafeno y Nanotubos**, Alicante, 15 de junio de 2007.

- *Cooper-Pair Propagation and Proximity Effect in Graphene* (Comunicación oral), José González Carmona.

**Workshop on Quantum Gravity and Black Holes**, San José (Almería), 8 a 10 de octubre de 2007.

- *The Fock Quantization of the Gowdy T3 Model* (Comunicación oral), J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.
- *Universe with Cosmological Constant in Loop Quantum Cosmology* (Comunicación oral), Tomasz H. Pawłowski.
- *Quasinormal Modes in BEC Black Holes* (Comunicación oral), C. Barceló, Luis J. Garay Elizondo y G. Jannes.
- *High-Order Gauge-Invariant Perturbations of a Spherical Spacetime* (Comunicación oral), David Brizuela Cieza, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.
- *Hybrid Quantization of the Linearly Polarized Gowdy T3 Model* (Comunicación oral), L. J. Garay, Mercedes Martín-Benito y G. A. Mena Marugán.
- *Uniqueness of the Fock Quantization of the Gowdy T3 Model* (Comunicación oral), J. Cortez, G. A. Mena Marugán y José Manuel Velhinho.

### **4.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

**XXVII Jornadas de Automática**, Universidad de Huelva, 5 a 7 junio 2007.

- *Control y sincronía de un chopper rápido para haces de neutrones*, P. Gómez, V. Etxebarria, Fco. Javier Bermejo Barrera y A. Izpizua.

**Reunión de trabajo: Proyecto EURONS-RHIB**, Santiago de Compostela, 23 de noviembre de 2007.

- *Diseño del Calorímetro R3B de FAIR* (Asistencia), Olof E. Tengblad y Manuela Turrión Nieves.

**20 Years of Collaboration between Spain and the ILL**, Secretaría de Estado de Universidades e Investigación, Madrid, 28 de noviembre de 2007.

- *A Prom along a Winding Path: Neutron Instruments "Made in Spain"* (Conferencia invitada), Fco. Javier Bermejo Barrera.

### **4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

**5<sup>a</sup> Reunión Española de Optoelectrónica, OPTOEL'07**, Bilbao, 11 a 13 de julio de 2007.

- *Vidrios de teluritos para aplicaciones fotónicas* (Póster), D. Muñoz-Martín, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, H. Fernández, J. Solís, J. García-López, J. V. García-Ramos, C. Domingo y M. A. Villegas. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**XXXI Reunión Bienal de Física**, Granada, 10 a 14 de septiennre de 2007.

- *Caracterización SERS del herbicida diquat sobre nanoestructuras de plata* (Póster), Concepción Domingo Maroto, M. R. López-Ramírez, J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortes. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- "Nanotecnologías" (Ponente invitada a Mesa Redonda), Concepción Domingo Maroto.

### **4.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**Jornada ASTROCAM/CosmoCaixa: De Madrid al cielo. Astrofísica y Empresa: mundos convergentes, visión de futuro**, Alcobendas, 23 de abril de 2007.

- *Una visión de la actividad científico-técnica de los Grupos de Astrofísica de la Comunidad de Madrid* (Comunicación invitada), José Cernicharo Quintanilla.

**2º Workshop ASTROCAM: Jóvenes astrofísicos de la Comunidad de Madrid**, Madrid, 19 a 21 de septiembre de 2007.

- *Astroquímica con Herschel y ALMA* (Comunicación oral), José Cernicharo Quintanilla.
- *El núcleo de NGC 4303* (Comunicación oral), Álvaro Labiano Ortega.
- *La química del fósforo en el espacio* (Comunicación oral), Marcelino Agúndez Chico.
- *Propiedades físico-químicas de las primeras fases evolutivas de ondas de choque en regiones de formación estelar* (Comunicación oral), Izaskun Jiménez Serra.

#### **4.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

**Jornadas sobre Aplicaciones Biomédicas de la Espectroscopía Infrarroja y Raman**, Santiago de Compostela, 10 a 11 de abril de 2007.

- *Las espectroscopías infrarroja y Raman como técnicas de biodiagnóstico* (Conferencia invitada), Pedro Carmona Hernández.

**5ª Reunión Española de Optoelectrónica, OPTOEL'07**, Bilbao, 11 a 13 de julio de 2007.

- *Vidrios de teluritos para aplicaciones fotónicas* (Póster) D. Muñoz-Martín, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, H. Fernández, J. Solís, J. García-López, J. V. García-Ramos, C. Domingo, M. A. Villegas. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**XXXI Reunión Bienal de Física**, Granada, 10 a 14 de septiembre de 2007.

- *Caracterización SERS del herbicida diquat sobre nanoestructuras de plata* (Póster), Concepción Domingo Maroto, M. R. López-Ramírez, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortes. (Conjunta con el Dpto. de FM).

#### **4.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

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

- *Crystallization of Polyamide 12/Carbon Nanofibers as Revealed by X-Ray Diffraction with Synchrotron Radiation*. (Póster), Amelia Linares Dos Santos, J. J. Hernández, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M. E. Cagliaio, D. R. Rueda, C. Merino y T.A. Ezquerro.
- *Applications of Synchrotron Radiation Micro-Diffraction to the Study of Soft Condensed Matter* (Comunicación oral), Mª Cruz García-Gutiérrez.
- *Nanostructured Polymer Surfaces by Spin Coating: A Combined Study by Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering (GISAXS) and Atomic Force Microscopy (AFM)*. (Póster), Jaime J. Hernández Rueda, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda y T.A. Ezquerro.

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

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

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

- Asistencia como Secretario del GEP, Javier Martínez-Salazar Bascuñana.

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

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

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

- (Asistencia) Francisco J. Baltá Calleja.

**1º Encuentro sobre Polioleofinas de Arquitectura Controlada: De la Síntesis al Producto**, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC), Madrid, 18 de octubre de 2007.

- *Estudio de las relajaciones moleculares de polietileno de baja cristalinidad obtenido mediante catalizador metalocénico* (Comunicación oral). Araceli Flores Aguilar-Amat, S. Martín, J. F. Vega, M. T. Expósito, J. Martínez-Salazar.

- *Efecto tandem en polietilenos bimodales obtenidos mediante síntesis en un único reactor* (Póster), J. Otegui, J. F. Vega, V. Cruz, O. Prieto, C. Martín y J. Martínez-Salazar.
- *Estructura de fases y propiedades reológicas de mezclas de polietilenos* (Póster), N. Robledo, J. F. Vega, J. Martínez-Salazar y J. Nieto.

## **4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES**

(Subrayado el nombre del ponente).

### **4.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

**2007 APS March Meeting**, Denver (E.E.U.U.), 5 a 9 de marzo de 2007.

- o *Quantum Hall Effect in Carbon Nanotubes and Curved Graphene Strips* (Comunicación oral), José González Carmona y Enrico Perfetto.
- o *Theory of Superconductivity in Multiwall Carbon Nanotubes* (Comunicación oral), Enrico Perfetto y José González Carmona.

**GRSweden**, Linköping (Suecia), 26 a 27 de abril de 2007.

- o *xTensor: a Fast Tensor Manipulator* (Comunicación oral), José M. Martín-García.

**BH2: Dynamics and Thermodynamics of Blackholes and Naked Singularities**, Milán (Italia), 10 a 12 de mayo de 2007.

- o *Non-Linear Perturbations on Spherical Backgrounds. Formalism and Algebraic Implementation* (Comunicación oral), David Brizuela Cieza, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.

**Loops' 07**, Morelia (México), 25 a 30 de junio de 2007.

- o *Unitarity and Uniqueness of the Fock Quantization of the Gowdy T3 Model* (Comunicación oral y Chairman de sesión paralela), A. Corichi, J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.
- o *Universe with Cosmological Constant in Loop Quantum Cosmology* (Comunicación oral), Tomasz H. Pawłowski.
- o *Quantization of Einstein-Rosen waves Coupled with Matter* (Comunicación oral), J. F. Barbero G., Iñaki Garay Elizondo y E. J. S. Villaseñor.

**18th International Conference on General Relativity and Gravitation**, Sydney (Australia), 8 a 13 de julio de 2007.

- o *Uniqueness of the Fock Quantization of the Gowdy T3 Cosmologies.* (Comunicación oral), J. Cortez, Guillermo A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.
- o *Quantum Aspects of S2 x S1 and S3 Gowdy Models Coupled to Matter* (Comunicación oral), J. Fernando Barbero González, D. Gómez Vergel y E. J. S. Villaseñor.

**Advances in Physics and Applications of Low-Dimensional Systems**, Brasilia (Brasil), 9 a 21 de julio de 2007.

- o *Cooper-Pair Propagation and Proximity Effect in Graphene* (Conferencia invitada), José González Carmona.

**Institute for Gravitation and the Cosmos Inaugural Conference**, State College (E.E.U.U.), 9 a 11 de agosto de 2007.

- o *Universe with Cosmological Constant in Loop Quantum Cosmology* (Conferencia plenaria invitada), Tomasz H. Pawłowski.

**Condensed Matter Meets Gravity**, Leiden (Holanda), 27 a 31 de agosto de 2007.

- o *Quasinormal Modes in BEC Black Holes* (Conferencia invitada), Luis J. Garay Elizondo.

**XVI Fall Workshop on Geometry and Physics**, Lisboa (Portugal), 5 a 8 de septiembre de 2007.

- o *Quantum Geometry and Quantum Gravity* (Minicurso invitado), J. Fernando Barbero González.
- o *Introduction to Quantum Mechanics* (Conferencia invitada), Eduardo J. Sánchez Villaseñor.

**XXX Spanish Relativity Meeting**, Puerto de la Cruz (Tenerife), 10 a 14 de septiembre de 2007.

- o *Invar: Computer Algebra for the Invariants of the Riemann Tensor* (Comunicación oral), José M. Martín-García, D. Yllanes y R. Portugal.

**Nanoscience and Nanotechnology 2007**, Frascati (Italia), 15 a 16 de octubre de 2007.

- *Cooper-Pair Propagation and Superconducting Correlations in Graphene* (Comunicación oral), José González Carmona y E. Perfetto.

#### **4.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

**Ecole Internationale Joliot Curie 2007**, Les Houches (Francia), 10 de enero de 2007.

- *Caractérisation d'un détecteur HPGe dans le cadre de l'étude des transitions de Fermi superpermises, 0+ à 0* (Comunicación oral), Jérôme Souin.

**Collaboration Meeting on Neutrino Mass Measurements and their Implications NUMMI'07**, Durham (Reino Unido), 10 a 12 de enero de 2007.

- *Different Approaches to the Determination of the Double Beta Decay Nuclear Matrix Elements in Deformed Nuclei* (Comunicación oral), Óscar Moreno Díaz, P. Sarriguren y E. Moya de Guerra.

**Reunión MAGISOL**, Madrid, 18 a 19 enero 2007.

- *Proton Detection with the R<sup>3</sup>B Calorimeter* (Comunicación oral), Aranzazu Maira Vidal.

**Disorder in Cold Atoms**, Barcelona, 24 a 26 de enero de 2007.

- *Localization Properties of Driven Disordered One-Dimensional Lattice* (Póster), Rafael Alejandro Molina Fernández.

**Nonequilibrium Transport of Strongly Correlated Systems**, Bad Honnef (Alemania), 30 de enero a 2 de febrero de 2007.

- *Conductance of One-Dimensional Strongly Correlated Systems: The Embedding Method* (Póster), Rafael Alejandro Molina Fernández.

**ISOLDE Users Meeting**, Ginebra, (Suiza), 12 a 14 de febrero de 2007.

- *Exploring the Nuclear Physics along the rp Process Path* (Conferencia invitada), Daniel Galaviz Redondo.

**SIAM Conference on Computational Science and Engineering**, Costa-Mesa (CA, E.E.U.U.), 19 a 23 de febrero de 2007.

- *Experimental Data Visualization: Some Alternatives to Equal-Width Binning* (Conferencia invitada), Ibon Bustinduy Uriarte.

**Symposium on Radiation Effects of Biomedical Interest**, CSIC, Madrid, 22 a 24 de febrero de 2007.

- *Spectral Characterization of RU-106 Plaques for Brachytherapy Purposes* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad y A. Maira Vidal.

**Nuclear Physics in Astrophysics III**, Dresden (Alemania), 26 a 31 de marzo de 2007.

- *Experimental Efforts and New Results along the rp-Process Path* (Comunicación oral), Daniel Galaviz Redondo.

**International Conference of Strongly Correlated Electron Systems 2007 (SCES'07)**, Houston (E.E.U.U.), 13 a 18 de mayo de 2007.

- *Numerical Estimation of Critical Parameters through the Bond Entropy* (Póster y comunicación oral), Rafael Alejandro Molina Fernández.

**Internacional Workshop on Direct Reactions with Exotic Beams, DREB2007**, Tokio (Japón), 30 de mayo a 2 de junio 2007.

- *Mapping of the <sup>12</sup>C\* States of Astrophysical Interest Via the <sup>10</sup>B(<sup>3</sup>He, p $\alpha\alpha\alpha$ ) Reaction* (Póster), Martín Alcorta Moreno.
- *Nuclear Shape Dependence of Gamow-Teller Distributions in Neutron Deficient Lead Isotopes* (Póster), Óscar Moreno Díaz, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez y E. Moya de Guerra.

**International Nuclear Physics Conference, INPC-2007**, Tokio (Japón), 1 al 9 de junio de 2007.

- *Mapping of the <sup>12</sup>C\* States via the <sup>10</sup>B(<sup>3</sup>He, p $\alpha\alpha\alpha$ ) Reaction* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad, M. Alcorta, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, L. Fraile, M. Madurga y M Turrión.
- *Single and Double Beta Decay in Deformed Nuclei* (Póster), P. Sarriguren, Óscar Moreno Díaz, E. Moya de Guerra y R. Álvarez-Rodríguez.

- *Nuclear Matrix Elements for the Double Beta Decay of  $^{150}\text{Nd}$*  (Póster), E. Moya de Guerra, R. Álvarez-Rodríguez, Oscar Moreno Díaz y P. Sarriguren.
- *Charge and Matter Distributions and Form Factors of Light, Medium, and Heavy Neutron-Rich Nuclei* (Póster), A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M.K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J.M. Udías, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya y G. Z. Krumova.

**Correlations beyond Mean-Field and Shell-Model Approaches.** ECT, Trento (Italia), 4 al 8 de junio de 2007.

- *Pairing Correlations, Cooper Pairs and Exactly Solvable n-p Pairing Models* (Conferencia invitada) Jorge Dukelsky Bercovich.

**International Workshop on Nuclear Structure: New Pictures in the Extended Isospin Space,** Kyoto (Japón), 11 a 14 de junio de 2007.

- *Exactly Solvable Proton-Neutron Pairing Models* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich.
- *Nuclear Shapes and Beta Decay in the Exotic Nuclei of the Lead Region* (Póster), Oscar Moreno Díaz, R. Álvarez-Rodríguez, E. Moya de Guerra y P. Sarriguren.

**International Symposium and School on Frontiers and Perspectives of Nuclear and Hadron Physics,** Tokio (Japón), 11 a 12 de junio de 2007.

- *Single and Double Beta Decay in Deformed Nuclei* (Comunicación oral), Oscar Moreno Díaz, P. Sarriguren, R. Álvarez-Rodríguez y E. Moya de Guerra.

**Frontiers and Perspectives of Nuclear and Hadron Physics (FPNH07),** Tokio (Japón), 11 a 12 de junio de 2007.

- *Study of Excited States of  $^{12}\text{C}$  in Full Kinematics* (Comunicación oral), Martín Alcorta Moreno.

**Proton Emitting Nuclei and Other Related Topics, PROCON 07,** Lisboa (Portugal), 18 a 22 de junio de 2007.

- *Recent Achievements in Beta Delayed Particle Studies* (Conferencia invitada), M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge.
- *Charged-Particle Channels in the  $\beta$ -Decay of  $^{11}\text{Li}$*  (Comunicación oral). R. Raabe, A. Andreyev, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, L. Buchmann, P. Capel, H. O. U. Fynbo, M. Huyse, R. Kanungo, T. Kirchner, C. Mattoon, A. C. Morton, I. Mukha, J. Pearson, J. Ponsaers, J. J. Ressler, K. Riisager, C. Ruiz, G. Ruprecht, F. Sarazin, O. Tengblad, P. Van Duppen y P. Walden.
- *Detector and Electronic Developments for Low Energy Particle Break-Up Studies* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad.
- *Decay of Neutron Deficient  $^{33}\text{Ar}$  &  $^{32}\text{Ar}$ , Revisited.* (Comunicación oral), Ricardo Domínguez Reyes, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, B. Blank, I. Matea, N. Adimi y J.C. Thomas.
- *Multiple Particle Emission after  $^{11}\text{Li}$  Beta-Decay: Exploring New Decay Channels* (Comunicación oral), Miguel Madurga Flores, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager y O. Tengblad.

**4th European Conference on Neutron Scattering,** Lund (Suecia), 25 a 29 de junio de 2007.

- *Spin Dynamics in CMR Perovskites Studied by NSE Techniques* (Comunicación oral), J. Gutierrez, Fco. Javier Bermejo Barrera, J. M. Barandiarán, P. Romano, C. Mondelli, P. Fouquet y M. Monkenbusch.
- *Short Range Order of Liquid and Orientationally Disordered Phases of  $\text{CCl}_4$*  (Comunicación oral), L. C. Pardo Soto, N. Veglio, G. J. Cuello, Fco. Javier Bermejo Barrera y J. Ll. Tamarit.
- *IMPS: The Multi-Analyser Detector System for the Termal Three-axis Spectrometer IN8* (Comunicación oral), M. Jiménez-Ruiz, P. Freeman, A. Hiess, S. Baudoin, P. Courtois, P. Van Esch, Y. Gibert, J. Beaucour, Fco. Javier Bermejo Barrera y J. Kulda.
- *The Role of the Interplay between Different Length Scales in the Glass Transitions of Freon Derivatives* (Comunicación oral), M. Rovira Esteva, L. C. Pardo, J. Ll. Tamarit, Fco. Javier Bermejo Barrera y G. J. Cuello.

**22nd Particle Accelerators Conference,** Albuquerque (NM, E.E.U.U.), 25 a 29 de junio de 2007.

- *Status Report on de RAL Front End Test Stand* (Comunicación oral), A. Letchford, D. Faricloth, A. Daly, M. A. Clarke-Gayther, C. Plostinar, C. Gabor, Yi A. Cheng, S. Jolly, A. Kurup, P. Savage, J. K. Pozimski, J. Bache, Fco. Javier Bermejo Barrera, J. Lucas, J. Alonso y R. Enparantza.

**26th International Workshop on Nuclear Theory,** Rila (Bulgaria), 25 a 30 de junio de 2007.

- *Signatures of Deformation in Single and Double Beta Decay* (Conferencia invitada). Pedro Sarriguren Suquibide, O. Moreno, E. Moya de Guerra y R. Álvarez-Rodríguez.

**Physics of Massive Neutrinos. Joint Annual Meeting of ILIAS N4/IDEA and ILIAS N6 ENTApP WP1,** Blaubeuren (Alemania), 1 a 5 de julio de 2007.

- *Selfconsistent Variational Methods Applied to Double Beta Decay Nuclear Matrix Elements* (Conferencia invitada), Elvira Moya de Guerra, O. Moreno y P. Sarriguren.

**FP7-JRA & Networking: Front End Electronics, Data Acquisition and Control Command**, Huelva, 18 a 20 de julio de 2007.

- *Information from the EURONS-FP7 Working Group* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad.

**Nordic Nuclear Meeting XI**, Gilleleje (Dinamarca), 12 a 17 de agosto de 2007.

- *Mapping of the  $^{12}\text{C}^*$  States and  $^9\text{B}^*$  States via the  $^{10}\text{B}(\beta^3\text{He}, paaa)$  Reaction* (Póster), Martín Alcorta Moreno.

**Euroschool on Exotic Beams**, Houlgate (Francia), 25 a 31 de agosto de 2007.

- *Neutron- $^3\text{H}$  Potentials and the  $^5\text{H}$ -Properties*. (Póster), Raúl de Diego Martínez.
- *Three-Body Structure of  $^{12}\text{Be}$*  (Póster), Carolina Romero Redondo.

**9th International Cluster Conference Clusters '07**, Stratford-Upon-Avon (Reino Unido), 3 a 7 de septiembre de 2007.

- *Study of Beta-Delayed Charged Particle Emission of  $^{11}\text{Li}$ : Evidence of New Decay Channels* (Comunicación oral), Miguel Madurga Flores, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager y O. Tengblad.

**Frontiers in Nuclear Structure, Astrophysics and Reactions, FINUSTAR2**, Creta (Grecia), 10 a 14 de septiembre de 2007.

- *Neutron Skins in Spherical and Deformed Nuclei from Skyrme HF Calculations* (Comunicación oral). Pedro Sarriguren Suquilbide, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra y A. N. Antonov.
- *$\beta$ -Delayed Particle Studies of the Halo Nucleus  $^{11}\text{Li}$  and the Core  $^9\text{Li}$*  (Comunicación oral). Miguel Madurga Flores, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager y O. Tengblad.

**20th European Conference on Few-Body Problems in Physics (EFB 20)**, Pisa (Italia), 10 a 14 de septiembre de 2007.

- *The  $2^+$  Resonance in  $^6\text{Li}$  and Isospin Mixing in Three-Body Decay* (Comunicación oral), Eduardo Garrido Bellido, D. V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y A. S. Jensen.
- *Energy Distributions of  $^{12}\text{C}$  Three-Body Decaying Resonances* (Póster), R. Álvarez-Rodríguez, Eduardo Garrido Bellido, A. S. Jensen, D. V. Fedorov y H. O. U. Fynbo.
- *Neutron- $^3\text{H}$  Potentials and the  $^5\text{H}$  Properties* (Póster), Raúl de Diego Martínez, E. Garrido, D. V. Fedorov y A. S. Jensen.

**EURONS-EURISOL Town Meeting**, Helsinki (Finlandia), 17 a 22 de septiembre de 2007.

- *Detection of Low Energy Particle EURONS-JRA4 DLEP* (Comunicación oral), Olof E. Tengblad.
- *Phoswich Detector for RHIB (JRA9)* (Póster), Manuela Turrión Nieves, A. Perea, B. El Bakkari, O. Tengblad, R. Rodríguez, T. El Bardouni y M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge.
- *Database and Web Application Access to EURISOL Beam Intensities for the Task 11* (Comunicación oral), Manuela Turrión Nieves.

**R<sup>3</sup>B and EXL Collaboration Meeting at GSI**, Darmstadt (Alemania), 15 a 18 de octubre de 2007.

- *Towards a Frontcap Design* (Comunicación oral), Manuela Turrión Nieves, B. El Bakkari y O. Tengblad

**International Workshop on on New Approaches in Nuclear Many-Body Theory**, Seattle (E.E.U.U.), 15 a 19 de octubre de 2007.

- *Pairing Correlations in Exactly Solvable Pairing Models* (Conferencia invitada), Jorge Dukelsky Bercovich.

**Kick-off Event and Symposium on Physics**, Darmstadt (Alemania), 7 a 8 de noviembre de 2007.

- *Inaguración oficial del proyecto FAIR* (Asistencia), M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, M. Turrión, O. Tengblad y D. Galaviz.

**Electroweak Interactions with Nuclei and Physics of the Quark-Gluon Plasma**, Trento (Italia), 26 a 30 de noviembre de 2007.

- *Many-Body Techniques at High Energies* (Conferencia invitada), M. Gaidarov, A. N. Antonov, Elvira Moya de Guerra y P. Sarriguren.

**ISOLDE Workshop and Users Meeting**, CERN, Ginebra (Suiza), 17 a 19 de diciembre de 2007.

- *Breakup of the 18.2 MeV state in  $^{11}\text{Be}$ : New Decay Modes* (Comunicación oral), Miguel Madurga Flores, M<sup>a</sup> J. G<sup>a</sup> Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, K. Riisager y O. Tengblad.

### 4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

**4th Nanospain Workshop**, Sevilla, 12 a 15 de marzo de 2007.

- *Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) of Herbicide Diquat on Silver Nanostructures* (Póster), M. R. López-Ramírez, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- *Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of PAHS: Dithiocarbamate Calix[4]Arene Derivative as an Effective Supramolecular Host* (Póster), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**The 2nd International Spectroscopy Conference**, Sousse (Túnez), 25 a 28 marzo de 2007.

- *Stimulated Raman: a Tool for High Resolution Molecular Spectroscopy* (Conferencia invitada), Dionisio Bermejo Plaza.

**Frontiers on Low Temperature Plasma Diagnostics Workshop**, Yorkshire (Reino Unido), 1 a 5 de abril de 2007.

- *Chemistry of Atoms and Ions in Low Temperature Plasmas* (Conferencia invitada), Isabel Tanarro Onrubia.

**Focus on Microscopy 2007**, Valencia, 10 a 13 de abril de 2007.

- *Confocal Micro-Raman and Micro-SERS Study of Chromosomes* (Póster), S. Sánchez-Cortés, G. Morcillo, J. V. García-Ramos y Concepción Domingo Maroto. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**HIELOCRIIS 2007, International Conference on Crystal Growth and Chemistry of Ice Thin Films under Extreme Conditions**, Mahón (Menorca), 26 a 28 de abril de 2007.

- *NAT Crystals: Interaction with HCl*, Rafael Escribano Torres.
- *RAIR Spectroscopy Studies of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> Ice Mixtures* (Comunicación oral), Óscar Gálvez González.
- *Structure and Spectroscopy of Amorphous Water Clusters* (Comunicación oral), Beatriz Martín Llorente.

**ECAMP9–9th European Conference on Atoms, Molecules and Photons**, Creta (Grecia), 6 a 11 de mayo de 2007.

- *A Femtosecond Fmaging Stopwatch for the Bond Breakage of a Polyatomic Molecule* (Comunicación oral), R. de Nalda, J. G. Izquierdo, J. Durá y L. Bañares.

**6th European Conference on Nonlinear Optical Spectroscopy**, San Petersburgo (Rusia), 12 a 15 de mayo de 2007.

- *Q- Branch Line Widths of N<sub>2</sub> Perturbed by H<sub>2</sub>: Experiments and Quantum Calculations from “Ab Initio” Potential*, Dionisio Bermejo Plaza.

**E-Materials Research Society 2007 Spring Meeting**, Estrasburgo (Francia), 28 de mayo a 1 de junio de 2007.

- *Interaction of Femtosecond Laser Pulses with Tempera Paints* (Póster), S. Gaspard, M. Oujja, R. Hesterman, P. Moreno, C. Méndez, A. García, C. Domingo y M. Castillejo.
- *Structure and Optical Properties of Tellurite Thin Film Glasses Grown by Pulsed Laser Deposition* (Póster), D. Muñoz-Martín, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Margueritat, J. García-López, C. Domingo y J. V. García-Ramos. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- *Femtosecond Laser Pulse Irradiation of Ancient Parchment* (Póster), M. Walczak, M. Oujja, L. Crespo-Arcá, A. García, C. Méndez, P. Moreno, C. Domingo y M. Castillejo.

**7th International Symposium on the Conservation of Monuments in the Mediterranean Basin**, Orléans (Francia), 6 a 9 de Junio de 2007.

- *Laser Cleaning of Stonework: Effect of Laser Irradiation and Analysis of Crusts* (Póster), M. Oujja, P. Pouli, C. Fotakis, C. Saiz-Jiménez, C. Domingo y M. Castillejo.

**4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS4)**, Corfú (Grecia), 10 a 14 de junio de 2007.

- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopies for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Z. Jurasekova, Concepción Domingo Maroto, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

- *Dithiocarbamate Calix[4]arene Derivative as an Effective Supramolecular Host for the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* (Comunicación oral), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, Concepción Domingo Maroto y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- *Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) of Herbicide Diquat on Silver Nanostructures* (Póster), M. R. López-Ramírez, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**International Symposium on Molecular Spectroscopy, 62nd Meeting**, Columbus (E.E.U.U.), 18 a 22 de junio de 2007.

- *Cometary Ice Analogs: TPD and FTIR Study of CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O Ices* (Comunicación oral), Victor J. Herrero Ruiz de Loizaga, R. Escribano, B. Maté, O. Gálvez, I. K. Ortega, B. Martín-Llorente y P. J. Gutiérrez.
- *RAIR Spectra of CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O Ices: Theoretical Prediction and Experimental Results* (Comunicación oral), Rafael Escribano Torres, V. J. Herrero, B. Maté, O. Gálvez, B. Martín-Llorente y E. Artacho.

**17th International Vacuum Conference, IVC17/ICSS13 & ICN+T**, Estocolmo (Suecia), 2 a 6 de julio de 2007.

- *Cleaning Efficiency of Carbon Films by Oxygen Plasmas in the Presence of Metallic Getters* (Comunicación oral), F. L. Tabarés, J. A. Ferreira, D. Tafalla, I. Tanarro, V. J. Herrero, C. Gómez-Aleixandre y J. M. Albella.

**12th International Congress on the Chemistry of Cement**, Montreal (Canadá), 10 a 13 de julio de 2007.

- *Long Term Hydration of White Portland Cement Assessed by Micro-Raman Spectroscopy* (Póster), Concepción Domingo Maroto, S. Martínez-Ramírez y M. Frías.

**28th ICPIG (International Conference on Processes in Ionized Gases)**, Praga (Rep. Checa), 15 a 20 de julio de 2007.

- *Mass Spectrometric Investigation of the Ion Chemistry in H<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> DC Discharges* (Póster), Isabel Tanarro Orrubia, Victor J. Herrero Ruiz de Loizaga, I. Méndez, A. M. Islyaikin, F. L. Tabarés y D. Tafalla.
- *Ion and Neutral Species in H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>+Ar and H<sub>2</sub>+N<sub>2</sub> Plasmas Generated in Low Pressure DC Discharges* (Póster), I. Méndez, Victor J. Herrero Ruiz de Loizaga e Isabel Tanarro Orrubia.

**Femtochemistry and Femtobiology 9**, Oxford (Reino Unido), 22 a 26 de julio de 2007.

- *Femtosecond Transition State Imaging of A band CH<sub>3</sub>I Photodissociation* (Póster), J. Durá, J. G. Izquierdo, L. Bañares, J. Álvarez y R. de Nalda.

**20th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy**, Dijon (Francia), 3 a 7 de septiembre de 2007.

- *State-to-State Rotational Relaxation Rates via Double Resonance Raman-Raman Spectroscopy. Experiment and Preliminary Results* (Póster), José Luis Doménech Martínez, R. Martínez y Dionisio Bermejo Plaza.
- *Analysis of the Spectrum of Ethylene in the 800-1500 cm<sup>-1</sup> Region Using Tensorial Formalism: Frequencies and Intensities* (Póster), M. Rotger, V. Boudon, A. Fayt, J. Vander Auwera, J. Demaison and Dionisio Bermejo Plaza.
- *Analysis of the Slit-Jet Fourier Spectrum of Ethylene near 3000 cm<sup>-1</sup> Using Tensorial Formalism*, M. Logroño, M. Rotger, V. Boudon, K. Didriche, M. Herman y Dionisio Bermejo Plaza.
- *Spectroscopy of H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> Ice Films as Cometary Nuclei Analogs*, Rafael Escribano Torres, O. Gálvez, V. J. Herrero, B. Martín-Llorente, B. Maté y M. A. Moreno.

**Frontiers in Science and Technology: Nano-Photonics and Optics (XIV International Summer School “Nicolás Cabrera”)**, Miraflores (Madrid), 17 a 21 de septiembre de 2007.

- *Molecular Nanosensors based on Localized Surface Plasmons: SERS, SEIRA and SEF* (Conferencia invitada), Concepción Domingo Maroto.

**VII International Conference on Lasers in the Conservation of Artworks, LACONA VII**, Madrid, 17 a 21 de septiembre de 2007.

- *Nanoparticle Enhanced Vibrational Spectroscopies: Molecular Chemosensing Techniques for Diagnosis of Artworks* (Conferencia plenaria), Concepción Domingo Maroto, M. V. Cañamares, Z. Jurasekova, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy Methods for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

- *Laser cleaning of Stonework: Effect of Laser Irradiation and Analysis of Crusts* (Póster), M. Oujja, M. Castillejo, B. Hermosín, C. Saiz-Jiménez, C. Domingo, P. Pouli y C. Fotakis.
- *Femtosecond vs Nanosecond Laser Cleaning of Historical Parchment* (Póster), M. Walczak, M. Oujja, L. Crespo-Arcá, A. García, C. Méndez, P. Moreno, C. Domingo y M. Castillejo.

**SERS round table 2007**, Ellenz-Poltersdorf (Alemania), 3 a 5 de octubre de 2007.

- *Functionalization of Nanostructured Metal Surfaces for Construction of SERS Sensors* (Comunicación oral), L. Guerrini, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**VII Iberoamerican Conference on Optics (RIO), Latinoamerican Meeting on Optics, Lasers and Applications (OPTILAS)**, Campinas (Brasil), 22 a 26 de octubre de 2007.

- *Dithiocarbamate Calix[4]arene Derivative as an Effective Supramolecular Host for the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* (Póster), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, Concepción Domingo Maroto y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).
- *Molecular Chemosensors Based on Nanostructured Metal Surfaces: SERS (Raman), SEIRA (Infrared) and SEF (Fluorescence)* (Conferencia plenaria), J. V. García-Ramos, L. Guerrini, Z. Jurasekova, M. R. López-Ramírez, C. Domingo, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés y P. Sevilla. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**Eu-ARTECH meeting**, Viena (Austria), 7 de noviembre de 2007.

- *Surface Enhanced Raman Scattering Applied to the Detection and Characterization of Natural Dyes* (Conferencia plenaria), Concepción Domingo Maroto, M. V. Cañamares, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**26th Conference on Dyes in History and Art (DHA26)**, Viena (Austria), 7 a 10 de noviembre de 2007.

- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy Methods for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de EVPM).

**American Geosciences Union (AGU 07)**, San Francisco (E.E.U.U.), 10 a 14 de diciembre de 2007.

- *Study of H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> Ices of Astrophysical and Planetary Interest* (Póster), Rafael Escribano Torres, O. Gálvez, Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga, B. Martín-Llorente, B. Maté y M. A. Moreno.

#### **4.2.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**Royal Astronomical Society. Specialized Discussion Meeting**, Londres (Reino Unido), 8 de enero de 2007.

- *Molecules as Probes of Galaxies* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.

**Workshop Herschel Open Time Key Program**, Noordwijk (Holanda), 20 a 21 de febrero de 2007.

- *"MAPSO" MAPping Sgr B2 and Orion Star Forming Regions* (Póster), José Cernicharo Quintanilla.
- *OT-KP: Line Surveys in Evolved Stars* (Póster), Juan Ramón Pardo Carrión.
- *The HIFI 'Mapping Observations' AOT* (Comunicación oral), Jesús Martín-Pintado Martín.

**EC Network Molecular Universe Mid-Term Review Meeting**, Perugia (Italia), 16 a 22 de marzo de 2007.

- (Asistencia) Lucie Vincent.

**Molecules in Space and Laboratory**, París (Francia), 13 a 16 de mayo de 2007.

- *Detection of New Molecular Complex Species in the ALMA Era* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *Chemical Complexity in Galactic Nuclei* (Comunicación oral), Jesús Martín-Pintado Martín.
- *Line Surveys in Evolved Stars and Their Global Analysis* (Conferencia invitada), Juan Ramón Pardo Carrión.

**4èmes Journées Terahertz**, Burdeos (Francia), 29 a 31 de mayo de 2007.

- *Atmospheric Opacity in the THz Domain and its Impact for Laboratory Development* (Conferencia invitada), Juan Ramón Pardo Carrión.

**Obscured AGN**, Munich (Alemania), 4 a 8 de junio de 2007.

- *Obscured AGN at Intermediate Redshifts* (Comunicación oral), Almudena Alonso Herrero.

**Molecular Spectroscopy Conference**, Ohio State University (E.E.U.U.), junio de 2007.

- *Ethane C-H Stretching Vibrational Spectra Coupling* (Comunicación oral), M.Villa, M. L.Senent y R. Hidalgo.

**Workshop High Angular Resolution Line Surveys of Orion**, Grenoble (Francia), 10 a 17 de junio de 2007.

- *Single Dish Line Surveys of Orion* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

**Site Testing at Dome C**, Roma (Italia), 11 a 13 de junio de 2007.

- *Atmospheric Monitoring of mm/sub-mm Astrophysical Bands* (Conferencia invitada), Juan Ramón Pardo Carrión.

**JWST Partner's Workshop**, Dublín (Irlanda), 11 a 14 de junio de 2007.

- (Participación) Santiago Arribas Mocoero y Luis Colina Robledo.

**Clumping in Hot-Star Winds**, Potsdam (Alemania), 17 a 22 de junio de 2007.

- *Tracking the Clumping in OB Stars from UV to Radio* (Comunicación oral), Francisco Najarro de la Parra.

**Through Disks to Stars and Planets**, Charlottesville (E.E.U.U.), 21 a 26 de junio de 2007.

- *On the Kinematics of Photoevaporating Disks: The Case of MWC349* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.

**Small Workshop on Massive Stars**, Alicante, 1 a 4 de julio de 2007.

- *Infrared Spectroscopy of Massive Stars in Obscured Regions* (Comunicación oral), Francisco Najarro de la Parra.

**The Large Millimeter Telescope: First-light Science and Future Surveys**, Puebla (México), 30 de julio a 10 de agosto de 2007.

- *The Dust Formation Zone of IRC+10216* (Comunicación oral), José Pablo Fonfría Expósito.

**XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina**, La Habana (Cuba), septiembre de 2007.

- *Estudio teórico del comportamiento energético y estructural del catión  $C_3H^+$*  (Póster), F. J. Meléndez, M. C. Sicilia, C. Muñoz-Caro, A. Niño y M<sup>a</sup> L. Senent.

**ALMA Community DAY. Surveys for ALMA**, Garching (Alemania), 3 a 6 de septiembre de 2007.

- *Lines Surveys Herschel* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *Spectral Line Surveys in Galaxies* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado.

**Star Clusters**, Granada (España), 11 a 12 de septiembre de 2007.

- *Massive Star Formation in Local Luminous Infrared Galaxies* (Conferencia invitada y póster), Almudena Alonso Herrero.

**Escuela de Astrobiología**, Propiano (Francia), 22 a 24 de septiembre de 2007.

- *Astrochemistry* (Conferencia invitada), José Cernicharo Quintanilla.

**Encuentros Astrofísicos Blas Cabrera: Workshop on Using the GTC and Its Day One Instruments**, La Palma (Canarias), 23 a 28 de septiembre de 2007.

- *CanariCam: Spectroscopy & Data Reduction* (Conferencia), Tanio Díaz Santos.

**JWST**, Tucson (Arizona, E.E.U.U.), 24 a 26 de septiembre de 2007.

- (Moderador de la sesión ISM) José Cernicharo Quintanilla.
- *Characterizing the Physical Properties of Local Luminous Infrared Galaxies* (Póster), Almudena Alonso Herrero.

**IRAM Observing School 2007**, Granada, 28 de septiembre a 5 de octubre de 2007.

- *Presentación del programa científico del instrumento Herschel-HIFI* (Conferencia), Jesús Martín-Pintado Martín.
- *Curso de Astrofísica Molecular* (Profesor), Juan Ramón Pardo Carrión.
- *Curso de Astrofísica Molecular* (Profesor ayudante), Miguel Ángel Requena Torres.

- *Curso de Astrofísica Molecular* (Profesor ayudante), Nuria Marcelino Lluh.
- (Asistencia) Lucie Vincent.

**Science with the VLE in the ELT Era**, Munich (Alemania), 8 a 11 de octubre de 2007.

- *Integral Field Spectroscopy of ULIRGs: from VLT to JWST* (Comunicación oral), Luis Colina Robledo.

**Jornadas Chilenas de Química**, Termas de Chillán (Chile), noviembre de 2007.

- *Química teórica aplicada a la astrofísica molecular: cadenas carbonadas tipo Cn* (Conferencia), M<sup>a</sup> L. Senent Díez, M. Hochlaf, H. Massó y R. Letelier.
- *Caracterización de especies de interés astrofísico mediante métodos ab initio: SiC3 lineal* (Póster), N. Inostroza, M<sup>a</sup> L. Senent Díez, M. Hochlaf y R. Letelier.
- *Autovalores del oscilador anarmónico tridimensional. Aplicación a la rotación-vibración de un trompo esférico* (Póster), R. Letelier, N. Inostroza y M<sup>a</sup> L. Senent Díez.

**FIR Workshop 2007**, Bad Honnef (Alemania), 4 a 8 de noviembre de 2007.

- *Chemical Complexity as a Tracer of Nuclear Activity* (Conferencia invitada), Jesús Martín-Pintado Martín.

**Royal Astronomical Society Meeting on MIRI**, Londres (Reino Unido), 9 de noviembre de 2007.

- *Mid-Infrared Properties of Local LIRGs: Prospects for MIRI* (Conferencia invitada), Almudena Alonso Herrero.

**Escuela de la Red Francesa de Química Teórica (RFCT)**, Giens (Francia), 2 a 7 de diciembre de 2007.

- (Asistencia) Fabien Daniel.

**First Madrid Advanced School of Astrophysics and Cosmology**, El Escorial (Madrid), 17 a 21 de diciembre de 2007.

- *Dense Molecular Gas Studies through Molecular Lines: Line Choices at Different z* (Comunicación oral invitada), José Cernicharo Quintanilla.
- *Probing the Physical Properties of Active Nuclei and Starburst Galaxies through High Sensitivity Infrared Observations* (Comunicación oral invitada), Luis Colina Robledo.
- *2D Kinematics of Luminous Infrared Galaxies with VMOS-VLT* (Póster), Julia Alfonso Garzón.
- *Tidal Dwarf Galaxies: Search, Formation and Evolution in a Sample of ULIRGs* (Póster), Daniel Miralles Caballero.

**Massive Stars as Cosmic Engines, Simposio 250 de la IAU**, Kauai (Hawaii, E.E.U.U.).

- *Metallicity Studies in the IR: Unveiling Obscured Clusters of Our Galaxy* (Comunicación oral), Francisco Najarro de la Parra.

#### **4.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

**4th Nanospain Workshop**, Sevilla, 12 a 15 de marzo de 2007.

- *Surface Plasmon Photonics on Metallic Nanostructures: SERS Substrates & Nanoantenna* (Comunicación oral), José A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, E. R. Méndez. O. Muskens y J. Gómez Rivas.
- *Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) of Herbicide Diquat on Silver Nanostructures* (Póster), M<sup>a</sup> Rosa López-Ramírez, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Description of Plasmonic Self-Imaging* (Póster), G. Martínez Niconoff y J. A. Sánchez-Gil.
- *Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of PAHS: Dithiocarbamate Calix[4]Arene Derivative as an Effective Supramolecular Host* (Póster), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**Focus on Microscopy 2007**, Valencia, 10 a 13 de abril de 2007.

- *Confocal Micro-Raman and Micro-SERS Study of Chromosomes* (Póster), S. Sánchez-Cortés, G. Morcillo, J. V. García-Ramos y C. Domingo. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**E-Materials Research Society 2007 Spring Meeting**, Strasbourg (Francia), 28 de mayo a 1 de junio de 2007.

- *Structure and Optical Properties of Tellurite Thin Film Glasses Grown by Pulsed Laser Deposition* (Póster), D. Muñoz-Martín, J. M. Fernández-Navarro, J. Gonzalo, J. Margueritat, J. García-López, C. Domingo y J. V. García-Ramos. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS4)**, Corfú (Grecia), 10 a 14 de junio de 2007.

- *Surface-Enhanced Raman scattering (SERS) of Herbicide Diquat on Silver Nanostructures* (Póster), M<sup>a</sup> Rosa López-Ramírez, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopies for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Dithiocarbamate Calix[4]arene Derivative as an Effective Supramolecular Host for the Surface-Enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* (Comunicación oral), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).

**Surface Plasmon Photonics 3**, Dijon (Francia), 17 a 22 de junio de 2007.

- *Surface Plasmon Resonances on Complex Metallic Nanostructures: Nano-Antennas, Nano-Stars & Nano-Trimers*, (Conferencia invitada), José A. Sánchez-Gil, V. Giannini, J. V. García-Ramos, O. Muskens, J. Gómez Rivas y E. Méndez.
- *Generation of Surface Plasmon Fields with Tunable Phase Parameters Using Diffracting Free Beams and Hollow Dark Beams* (Póster), G. Martínez-Niconoff y J. A. Sánchez-Gil.
- *Strong Enhancement of Spontaneous Emission of Light Sources by Single Plasmonic Nanoantennas* (Comunicación oral), O. Muskens, J. Gómez Rivas, V. Giannini y J. A. Sánchez-Gil.

**SPIE (The International Society for Optical Engineering) Optics + Photonics 2007 Symposium on NanoScience + Engineering**, San Diego (E.E.U.U), 26 a 30 de agosto de 2007.

- *Surface Plasmon Resonances on Nano-Antennas, Nano-Stars & Nano-Trimers* (Comunicación oral), Vincenzo Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos, O. Muskens, J. Gómez Rivas y E. Méndez.
- *Semiconductor Active Plasmonics* (Comunicación oral), J. Gómez Rivas, J. A. Sánchez-Gil.

**12th European Conference on on the Spectroscopy of Biological Molecules (ECSBM2007)**, París (Francia), 1 a 6 de septiembre de 2007.

- *Surface-Enhanced Optical Spectroscopy Applied to Photoactive Antitumoral Dyes* (Conferencia plenaria), José Vicente García-Ramos, C. Domingo, P. Sevilla, M. R. López-Ramírez, L. Guerrini, Z. Jurasekova y S. Sánchez-Cortés.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Dehydration Effect of Wheat Dietary Fibre on Protein Matrix of Surimi Gel* (Póster), A. Rodríguez-Casado, I. Sánchez-González, M. Careche y Pedro Carmona Hernández.
- *Drug Induced Oxidative Stress and Amyloid Protein Structure* (Póster), A. Rodríguez-Casado, I. Álvarez, A. Toledano, E. De Miguel y Pedro Carmona Hernández.
- *Protein-Nucleic Acid Interactions in Hepatitis C Virus* (Póster), M<sup>a</sup> Aránzazu Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.
- *Surface-Enhanced Fluorescence of Emodin, an Antitumoral Drug* (Póster), P. Sevilla, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos.
- *Interaction between Metals and Flavonoids: Spectroscopy and Pulse Radiolysis Studies* (Póster), A. Torreggiani, M. Tamba, Z. Jurasekova, M. D'Angelantonio, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

**VII International Conference on Lasers in the Conservation of Artworks, LACONA VII**, Madrid, 17 a 21 de septiembre de 2007.

- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy Methods for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Zuzana Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Nanoparticle Enhanced Vibrational Spectroscopies: Molecular Chemosensing Techniques for Diagnosis of Artworks* (Conferencia plenaria), C. Domingo, M. V. Cañameres, Z. Jurasekova, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos.  
(Conjunta con el Dpto. de FM).

**Frontiers in Science and Technology: Nano-Photonics and Optics (XIV International Summer School "Nicolás Cabrera")**, Miraflores (Madrid), 17 a 21 de septiembre de 2007.

- *Surface Plasmon Optics on Metal Nano-Structure* (Conferencia invitada), José A. Sánchez-Gil.

**SERS Round Table 2007**, Ellenz-Poltersdorf (Alemania), 3 a 5 de octubre de 2007.

- *Functionalization of Nanostructured Metal Surfaces for Construction of SERS Sensors* (Comunicación oral), Luca Guerrini, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**VII Iberoamerican Conference on Optics (RIO), Latinoamerican Meeting on Optics, Lasers and Applications (OPTILAS)**, Campinas (Brasil), 22 a 26 de octubre de 2007.

- *Molecular Chemosensors Based on Nanostructured Metal Surfaces: SERS (Raman), SEIRA (Infrared) and SEF (Fluorescence)* (Conferencia plenaria), José Vicente García-Ramos, L. Guerrini, Z. Jurasekova, M. R. López-Ramírez, C. Domingo, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, S. Sánchez-Cortés y P. Sevilla. (Conjunta con el Dpto. de FM).
- *Dithiocarbamate Calix[4]arene Derivative as an Effective Supramolecular Host for the Surface-enhanced Raman Scattering Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* (Póster), L. Guerrini, J. V. García-Ramos, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**Eu-ARTECH Meeting**, Viena (Austria), 7 de noviembre de 2007.

- *Surface Enhanced Raman Scattering Applied to the Detection and Characterization of Natural Dyes* (Conferencia plenaria), C. Domingo, M. V. Cañamares, Z. Jurasekova, S. Sánchez-Cortés y J. V. García-Ramos. (Conjunta con el Dpto. de FM).

**26th Conference on Dyes in History and Art (DHA26)**, Viena (Austria) 7 a 10 de noviembre de 2007.

- *Application of Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy Methods for the Identification of Flavonoid Molecules Employed as Dyes in the Cultural Heritage* (Póster), Zuzana Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés. (Conjunta con el Dpto. de FM).

#### **4.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

**Satellite Meeting: Present Status and Future Perspectives of SAXS, WAXS, and GISAXS Experiments at HASYLAB**, Hamburgo (Alemania), 24 a 26 de febrero de 2007.

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

**WP9 IDECAT Workshop: Industry-Academia Partnerships in Catalysis**, Sevilla, 29 a 30 de marzo de 2007.

- (Asistencia) Javier Martínez-Salazar Bascañana y F. Javier Ramos Díaz.

**High Performance Computing in Molecular Simulations**, Madrid, abril de 2007.

- *Electric Field Effect on Ethylene Polymerization with Zirconocene Catalysts* (Póster), Víctor L. Cruz Cañas y Javier Martínez-Salazar Bascañana.

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

- (Asistencia como miembro del Comité) Javier Martínez-Salazar Bascañana.

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

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

**Workshop: Scientific Opportunities at X-Ray Free Electron Lasers, AUSE**, Madrid, 23 a 24 de abril de 2007.

- (Asistencia) Francisco J. Baltá Calleja, Araceli Flores Aguilar-Amat, Fernando Ania García, Tiberio A. Ezquerro Sanz, Aurora Nogales Ruiz, M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez y Daniel R. Rueda Bravo.

**12th Symposium: Nanostructured Biomaterials Characterization and Properties**, Wittenberg (Alemania), 10 a 11 de mayo de 2007.

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

**Excellence Initiative of the DFG in the Area of Macromolecular Science**, Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Bonn (Alemania), 3 a 8 de junio de 2007.

- (Asistencia) Francisco J. Baltá Calleja.

**Reunión Anual de la Fundación Alexander von Humboldt**, Berlín (Alemania), 14 a 16 de junio de 2007.

- (Asistencia) Francisco J. Baltá Calleja.

**European Polymer Federation Congress, EPF 2007**, Portorož (Eslovenia), 2 a 6 de julio de 2007.

- *The Role of the Interphase in the Viscoelastic Response of LLDPE/LDPE Blends* (Póster), N. Robledo, J. F. Vega, Javier Martínez-Salazar Bascuñana y J. Nieto.
- *Hierarchical Monte Carlo/Molecular Dynamics Simulation of Short Chain Branched Polyethylenes in the Molten State* (Póster), F. Javier Ramos Díaz, Javier Martínez-Salazar Bascuñana, L. D. Peristeras y D. N. Theodorou.
- *Iron-Based Post-Metallocene Catalyst for Ethylene Polymerization: Establishing the Nature of the Active Species* (Póster), J. Martínez, V. L. Cruz, Javier Martínez-Salazar Bascuñana, F. Javier Ramos Díaz, S. Gutierrez-Oliva y A. Toro-Labbe.
- *Elongational Properties and Elimination of Extrudate Distortions in Polyethylene Blends* (Comunicación oral), Juan Fco. Vega Borrego, J. Otegui, M. T. Expósito y J. Martínez-Salazar.
- *Electric Field Effect on Ethylene Polymerization with Zirconocene Catalysts* (Póster), V. L. Cruz, J. Martínez-Salazar Bascuñana.

**Asamblea General de la European Polymer Federation**, Portorož (Eslovenia), 7 de julio de 2007.

- (Asistencia) Javier Martínez-Salazar Bascuñana.

**3rd International Indentation Workshop**, Cambridge (Reino Unido), 15 a 20 de julio de 2007.

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

**SOLEIL**, GIF-sur-YVETTE (Francia), 11 a 13 de julio de 2007.

- (Asistencia como miembro del SAC) Tiberio A. Ezquerro Sanz.

**6ª Conferencia Iberoamericana en Sistemas, Cibernética e Informática (CISCI 2007)**, Orlando (Florida, E.E.U.U.), 12 a 15 de julio de 2007.

- (Asistencia) M<sup>a</sup> José Capitán Aranda.

**234th National Meeting American Chemical Society**, Boston (MA, E.E.U.U.), 19 a 23 de agosto de 2007.

- *Using the Beta-Relaxation as a Probe to Follow Real-Time Polymer Crystallization in Model Aliphatic Polyesters* (Conferencia invitada), Tiberio A. Ezquerro Sanz.

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

- (Asistencia) Víctor L. Cruz Cañas.

**MTS Nano User's Meeting Exploring Nanomechanics**, Madrid, 6 y 7 de septiembre de 2007.

- (Asistencia) Fernando Ania García y Araceli Flores Aguilar-Amat.

**Nanoconsortium Annual Meeting**, Dublín (Irlanda), 9 a 12 de septiembre de 2007.

- (Asistencia) Víctor L. Cruz Cañas.

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

- *Broadband Electrical Conductivity of Polymer Nanocomposites with Carbon Nanoadditives* (Póster). T.A. Ezquerro, I. Matín Gullón, Amelia Linares Dos Santos, J. C. Canalda, M. E. Cagiao y R. Andrews.
- *Deformation Behaviour during Cold Drawing of Nanocomposites Based on Single Wall Carbon Nanotubes and Poly(Ether Ester)* (Comunicación oral), M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez, J. J. Hernández, A. Nogales, D. R. Rueda, A. Sanz, Z. Roslaniec, G. Broza y T. A. Ezquerro.
- *Influence of Preparation Procedure on the Conductivity and Transparency of SWCNT-Polymer Nanocomposites* (Póster), J. J. Hernández, M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, M. Kwiatkowska, Z. Roslaniec y T.A. Ezquerro.

**COST P12 Conference 2007. Discussion Meeting on Polymer Crystallisation**, Waldau (Alemania), 3 a 6 de octubre de 2007.

- *Effect of Branching on Early Nucleation Stages of Polyethylene: A Stochastic Study* (Póster). F. Javier Ramos Díaz y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.

- *The Beta-Relaxation as a Probe to Follow Real-Time Polymer Crystallization in Model Aliphatic Polyesters* (Póster), M. Soccio, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari, J. J. Hernández y Tiberio A. Ezquerro Sanz.
- *A New Approach to Model Re-Crystallization in PET* (Póster), M. Pieruccini, A. Flores, G. Di Marco, U. Nöchel, N. Stribeck y F. J. Baltá Calleja.

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

- *Recrystallization studies in Cold Crystallized PET* (Comunicación oral), Araceli Flores Aguilar-Amat, M. Pieruccini, F. Ania y F. J. Baltá Calleja.
- *Influence of Shear on the Templated Crystallization of Poly(Butylenes Terephthalate)/Single Wall Carbon Nanotube Nanocomposites* (Póster), M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez, J. J. Hernández, A. Nogales, P. Panine, D. R. Rueda y T.A. Ezquerro.
- *A New Approach to Model Re-Crystallization in PET* (Póster), M. Pieruccini, A. Flores, G. Di Marco, U. Nöchel, N. Stribeck y F. J. Baltá Calleja.

**The China-Netherlands Symposium on Electron Microscopy**, Pekín (China), 14 a 17 de noviembre de 2007.

- (Asistencia) Javier Martínez-Salazar Bascuñana y Juan Francisco Vega Borrego.

**IV Congreso Argentino-Chileno de Polímeros, Archipol 2007**, Viña del Mar (Chile), 3 a 5 de diciembre de 2007.

- *A Molecular Route to Improve Processability in Metallocene Polyethylenes* (Comunicación oral). Javier Martínez-Salazar Bascuñana, J. F. Vega y M. T. Expósito.

### 4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

#### 4.3.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

- ❖ **Prof. Carsten Gundlach**, University of Southampton, Reino Unido, 27 de agosto a 2 de septiembre de 2007.
- ❖ **Prof. José M. Velhinho**, Universidade da Beira Interior, Covilha, Portugal, 12 a 15 de febrero de 2007.
- ❖ **Dr. Tomasz H. Pawlowski**, Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U., 14 a 22 de marzo de 2007.
- ❖ **Dr. Hanno Sahlmann**, Utrecht University, Utrecht, Holanda, 9 a 16 de diciembre de 2007.
- ❖ **Dr. Ulrich Sperhake**, University of Jena, Alemania, 11 a 27 de marzo de 2007.

#### 4.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

- ❖ **Prof. Héctor Álvarez Pol**, GSI, Damstadt, Alemania, 13 a 17 de abril 2007.
- ❖ **Prof. A. N. Antonov**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy. Academia de Ciencias de Bulgaria, Sofia, Bulgaria, 15 de octubre a 15 de noviembre de 2007.
- ❖ **Prof. Bertram Blanck**, CENBG, CNRS, Burdeos, Francia, 9 a 13 de abril de 2007.
- ❖ **Prof. Gabor G. Kiss**, ATOMKI Institute, Debrecen, Hungría, 12 a 18 de mayo de 2007.
- ❖ **Dra. Sevdalina Dimitrova**, Academia de Ciencias de Bulgaria, Bulgaria, 9 a 15 de julio de 2007.
- ❖ **Dr. M. K. Gaidarov**, Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy. Academia de Ciencias de Bulgaria, Sofia, Bulgaria, 1 de enero a 31 de diciembre de 2007.
- ❖ **Dr. Göran Nyman**, Universidad Tecnológica de Chalmers, Göteborg, Suecia, 20 a 25 de agosto de 2007.
- ❖ **Dra. Mirta Rodríguez**, ICFO, Barcelona, 10 a 14 de marzo de 2007 y 30 de agosto a 3 de septiembre de 2007.
- ❖ **Dr. Stefan Rombouts**, Universidad de Gante, Bélgica, 22 de enero a 3 de febrero de 2007.
- ❖ **Dr. Marco Roncaglia**, Universidad de Bolonia, Italia, 8 a 14 de julio de 2007.
- ❖ **Dr. Peter Schmitteckert**, Universidad de Karlsruhe, Alemania, 1 a 4 de noviembre de 2007.
- ❖ **Guillermo Dussel**, Universidad de Buenos Aires, Argentina, 9 a 22 de septiembre de 2007.
- ❖ **Wictor Kurcevicz**, Warsaw University, Varsovia, Polonia, 16 a 19 de octubre de 2007.
- ❖ **Stephane Baptiste Pietri**, INP-Orsay, Francia, 7 a 14 de enero de 2007.
- ❖ **Nicu Sandulescu**, 18 de noviembre a 31 de diciembre de 2007.

#### 4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

- ❖ **Prof. Carlo di Lauro**, Universidad de Nápoles, Italia, 1 de noviembre a 31 de diciembre de 2007.
- ❖ **Prof. Erich Knözinger**, Universidad Técnica de Viena, Austria, 25 a 29 de junio de 2007.
- ❖ **Prof. Robert J. Hinde**, University of Tennessee, Knoxville, TN, E.E.U.U., 21 a 25 de mayo de 2007.
- ❖ **Dra. Tatiana Elizarova**, Academia de Ciencias de Rusia, Moscú, Rusia, 4 a 11 de mayo de 2007.
- ❖ **Dr. Ismael K. Ortega**, University of Helsinki, Finlandia, 29 de octubre a 2 de noviembre de 2007.
- ❖ **Dr. Anja Zoermer**, Universidad Técnica de Viena, Austria, 18 a 23 de febrero de 2007.
- ❖ **Francois Xavier Hardy**, Université de Rennes I, Francia, 1 de mayo a 31 de julio de 2007.

#### 4.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

- ❖ **Prof. Adel Ben Houria**, Universidad de Túnez El Manar, Túnez, 1 a 15 de septiembre y 25 de noviembre a 8 de diciembre de 2007.
- ❖ **Prof. Majdi Hochlaf**, Universidad de Marne la Vallée, París, Francia, 22 a 29 de junio y 1 a 8 de septiembre de 2007.
- ❖ **Prof. Bertrand Lefloch**, LAOG, CNRS, Grenoble, Francia, 15 a 19 de enero, 26 de marzo a 3 de abril, 21 de mayo a 3 de junio, y 15 a 19 de octubre de 2007.
- ❖ **Prof. Ricardo Letelier**, Universidad de Chile, Chile, 3 a 18 de mayo de 2007.
- ❖ **Prof. Mark Morris**, UCLA, Los Ángeles, E.E.U.U., 8 a 22 de septiembre de 2007.
- ❖ **Profa. María Villa Villa**, Universidad Autónoma Metropolitana de México, México, 1 a 15 septiembre de 2007.
- ❖ **Dra. Serena Vitti**, University College, Londres, Reino Unido, 2 de septiembre a 28 de octubre de 2007.
- ❖ **Ben Davies**, Rochester Institute of Technology, NY, E.E.U.U., 25 a 30 de mayo de 2007.
- ❖ **Natalia Pilar Hinostroza**, Universidad Andrés Bello, Chile, 1 de julio a 15 de agosto de 2007.
- ❖ **Chris Packham**, Florida University, FL, E.E.U.U., 2 a 7 de octubre de 2007.
- ❖ **Rainer Schoedel**, Universidad de Colonia, Alemania, 1 semana en septiembre, 1 en octubre y 1 en noviembre de 2007.

#### 4.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPÍA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

- ❖ **Prof. Marcelo Campos-Vallette**, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 5 a 25 de octubre de 2007.
- ❖ **Profa. Giulietta Smulevich**, Departamento de Química, Universidad de Florencia, Florencia, Italia, 19 a 23 de febrero de 2007.
- ❖ **Prof. Valtencir Zucolotto**, Instituto de Física de Sao Carlos, Universidad de Sao Paulo, Brasil, 2 al 4 de septiembre de 2007.
- ❖ **Dr. Michele di Foggia**, Departamento de Bioquímica, Universidad de Bolonia, Bolonia, Italia, 23 de abril a 5 de mayo de 2007.
- ❖ **Dr. J. Gómez Rivas**, FOM-Institute AMOLF & Philips Research Labs, Eindhoven, Holanda, 15 a 20 de octubre de 2007.
- ❖ **Dr. Barry Howes**, Departamento de Química, Universidad de Florencia, Florencia, Italia, 19 a 23 de febrero de 2007.
- ❖ **Dr. Daniel Jancura**, Departamento de Biofísica, Universidad P. J. Safarik, Kosice, Eslovaquia, 19 a 23 de marzo de 2007.
- ❖ **Dra Dana Pokorná**, Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., República Checa, 26 de noviembre a 2 de diciembre de 2007.
- ❖ **Dra. Maria Stehlikova**, Departamento de Biofísica, Universidad P. J. Safarik, Kosice, Eslovaquia, 19 a 23 de marzo de 2007.
- ❖ **Dra Markéta Urbanová**, Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., República Checa, 26 de noviembre a 2 de diciembre de 2007.
- ❖ **Tatiana Falcón**, Instituto de Investigaciones Estéticas, UNAM, México DF, México, 30 de octubre a 16 de noviembre de 2007.
- ❖ **Gejza Lajos**, Departamento de Biofísica, Universidad P. J. Safarik, Kosice, Eslovaquia, enero a marzo de 2007.
- ❖ **Lorena Roldán**, Universidad Nacional de Tucumán, San Miguel de Tucumán, Argentina, 2 de septiembre a 31 de diciembre de 2007.

#### **4.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

- ❖ **Dra. M. Soledad Gutiérrez Oliva**, Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile, 1 a 15 de octubre de 2007.
- ❖ **Said Bouhelal**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Argelia, 14 de abril a 10 de junio y 15 de julio a 1 de agosto de 2007.
- ❖ **Abdelhak Hellati**, Université Ferhat Abbas, Sétif, Argelia, 13 de noviembre a 8 de diciembre de 2007.
- ❖ **Sven Henning**, Universidad de Halle, Alemania, 2 a 16 de octubre de 2007.
- ❖ **Michelina Soccio**, Universidad de Bolonia, Bolonia, Italia, 6 de mayo a 31 de julio de 2007.
- ❖ **Alejandro Toro-Labbé**, Laboratorio de Química Teórica Computacional, Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile, 1 a 15 de octubre de 2007.

#### **4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS**

##### **4.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

**Dr. Andrés Cano.**

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Granada.

*Defect-Induced Damping of the Lattice Vibrations: a Key Factor at Low Temperatures.*

Fecha: 25 de abril de 2007.

**Dr. Tomasz H. Pawlowski.**

Penn State University, E.E.U.U.

*Dynamics of an Isotropic Universe from Loop Quantum Cosmology.*

Fecha: 19 de marzo de 2007.

**Dr. Hanno Sahlmann.**

Utrecht University, Holanda.

*Toy Black Holes, and Entropy Quantization: Aspects of Black Holes in Loop Quantum Gravity.*

Fecha: 12 de diciembre de 2007.

**Jacobo Díaz-Polo.**

Universidad de Valencia, Valencia.

*Entropía de Agujeros Negros en Loop Quantum Gravity.*

Fecha: 30 de mayo de 2007.

**Gil Jannes.**

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Granada.

*El Mecanismo de Higgs.*

Fecha: 19 de febrero de 2007.

**Gil Jannes.**

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC), Granada.

*Agujeros Negros en Condensados de Bose-Einstein: Estabilidad y Modos Cuasinormales.*

Fecha: 26 de abril de 2007.

**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.

*Diffeomorphism Invariance in Loop Quantum Gravity.*

Fecha: 27 de febrero de 2007.

**- Prof. Martin Bojowald.**

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

*KITP Program on Singularities Summary.*

Fecha: 24 de abril de 2007.

- **Prof. Alejandro Corichi.**

Universidad Nacional Autónoma de México, Morelia, México.  
*Relation between Schroedinger and Polymer Quantum Mechanics.*  
Fecha: 6 de marzo de 2007.

- **Prof. Laurent Freidel.**

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.  
*Matter Coupling to 3d Quantum Gravity and EFT (I y II).*  
Fecha: 15 de mayo de 2007.  
Fecha: 22 de mayo de 2007.

- **Prof. Kirill Krasnov.**

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.  
*Non Metric Gravity.*  
Fecha: 20 de marzo de 2007.

- **Prof. Jorge Pullin.**

Louisiana State University, Baton Rouge, E.E.U.U.  
*Loop Quantization of Spherically Symmetric Spacetimes.*  
Fecha: 27 de marzo de 2007.

- **Prof. Lee Smolin.**

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.  
*Emergent Chiral Excitations of Quantum Geometries: Progress Report.*  
Fecha: 3 de abril de 2007.

- **Prof. José Antonio Zapata.**

Universidad Nacional Autónoma de México, Morelia, México.  
*Effective Theories, Continuum Limit and Background Independence in LQG.*  
Fecha: 10 de abril de 2007.

- **Dr. Michele Arzano.**

Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.  
*Kappa Poincaré Space-Time Symmetries.*  
Fecha: 13 de marzo de 2007.

- **Dr. Dan Christensen.**

University of Western Ontario, London, Canadá.  
*Computations Involving SN, SF, QG and LGT.*  
Fecha: 30 de octubre de 2007.

- **Dr. Jonathan Engle.**

Centre de Physique Théorique de Marseille, Marsella, Francia.  
*The LQG Vertex: A Proposal.*  
Fecha: 18 de septiembre de 2007.

- **Dr. Garrett Lisi.**

Fundación "Foundational Questions in Physics and Cosmology", E.E.U.U.  
*A Connection with Everything.*  
Fecha: 13 de noviembre de 2007.

- **Dr. Radu Roiban.**

Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U.  
*UV Properties of N=8 Supergravity: Is It Finite?*  
Fecha: 13 de febrero de 2007.

- **Dr. David Sloan.**

Penn State University, University Park, PA, E.E.U.U.  
*Strong Gravity and the BKL Conjecture.*  
Fecha: 16 de octubre de 2007.

- **Dr. Johannes Tambornino.**  
Perimeter Institute, Waterloo, Canadá.  
*Relational Observables and Cosmological Perturbation Theory.*  
Fecha: 4 de septiembre de 2007.

- **Dr. Kevin Vandersloot.**  
University of Portsmouth, Portsmouth, Reino Unido.  
*Schwarzschild Interior with Loop Quantum Effects.*  
Fecha: 27 de noviembre de 2007.

#### **4.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

- **Dr. L. M. Fraile Prieto.**  
*The ISOLDE Facility: Present and Future Opportunities.*  
Fecha: 15 de marzo de 2007.

- **Dr. Peter Geltenbort.**  
Institut Laue –Langevin (ILL), Grenoble, Francia.  
*Physics with Ultra-Cold Neutrons (UCN).*  
Fecha: 30 de noviembre de 2007.

- **Dr. Juan José Rodríguez Ripoll.**  
Universidad Complutense de Madrid.  
*Estados producto de matriz.*  
Fecha: 6 de marzo de 2007.

- **Dra. Mirta Rodríguez Pinilla.**  
ICFO, Barcelona.  
*Interferometría de alta precisión con gases atómicos ultrafríos.*  
Fecha: 12 de marzo de 2007.

- **Dr. Marco Roncaglia.**  
Universidad de Bolonia, Italia.  
*Qubit Teleportation and Transfer across Spin Chains.*  
Fecha: 10 de julio de 2007.

- **Dra. Inmaculada Sagrado García.**  
CNRS, Saclay, Francia.  
*Estudio de reacciones ( $n,Xn$ ) para futuros sistemas de incineración de residuos con acelerador.*  
Fecha: 16 de noviembre de 2007.

- **Dr. Peter Schmiteckert.**  
Universidad de Karlsruhe, Alemania.  
*Transport Calculations Using Exact DFT Functionals.*  
Fecha: 2 de noviembre de 2007.

#### **4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

- **Prof. Robert J. Hinde.**  
University of Tennessee, Knoxville, TN, E.E.U.U.  
*Computational Vibrational Spectroscopy of Para-Hydrogen Aggregates: New Results and New Questions.*  
Fecha: 21 de mayo de 2007.

- **Prof. Erich Knözinger.**  
Universidad Técnica de Viena, Austria.  
*Non-Equilibrium Solids – Synthesis and Applications.*  
Fecha: 29 de junio de 2007.

- **Dr. Ismael K. Ortega.**  
University of Helsinki, Finlandia.  
*El papel del amoníaco en el crecimiento de nanoclusters de ácido sulfúrico en la atmósfera.*  
Fecha: 30 de octubre de 2007.

#### **4.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**- Prof. Mark Morris.**

UCLA, Los Ángeles, E.E.U.U.  
*The Magnetic Field at the Galactic Center.*  
Fecha: 14 de septiembre de 2007.

**- Dra. Estelle Bayet.**

University College, Londres, Reino Unido.  
*Massive Stars Formation in Extragalactic Sources: Chemical and Physical Properties.*  
Fecha: 3 de octubre de 2007.

#### **Seminarios ASTROCAM**

**- Dr. Julien Devriendt.**

Centre de Recherche Astrophysique de Lyon, Francia.  
*GALICS: A Multi-Wavelength Model of Hierarchical Galaxy Formation.*  
Fecha: 8 de marzo de 2007.

**- Dr. David García Álvarez.**

Astrophysics Group, Imperial College, Londres, Reino Unido.  
*Estudio de las coronas de estrellas de tipo tardío con espectroscopía de alta resolución.*  
Fecha: 25 de enero de 2007.

**- Dr. Alexis Klutsch.**

Observatoire Astronomique de Strasbourg, Francia.  
*Stellar X-Ray Sources as Diagnostic of the Local Star Formation History.*  
Fecha: 30 de octubre de 2007.

**- Dr. Ryszard Szczerba.**

N. Copernicus Astronomical Center, Torun, Polonia.  
*Post-AGB Phase of Stellar Evolution.*  
Fecha: 11 de diciembre de 2007.

**- Dr. Roberto Terlevich.**

Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Puebla, México.  
*The Youngest HII Galaxies.*  
Fecha: 4 de diciembre de 2007.

**- Dra. Patricia B. Tissera.**

Institute for Astronomy and Space Science, Conicet-UBA, Argentina.  
*Interacciones de galaxias.*  
Fecha: 12 de febrero de 2007.

**- Dra. Brigitta von Rekowski.**

University of St. Andrews, Escocia, Reino Unido.  
*Global MHD Simulations of Star-Disc Systems (Application to Classical T Tauri Stars).*  
Fecha: 15 de febrero de 2007.

#### **4.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

**- Prof. Marcelo Campos-Valette.**

Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile.  
*Raman de sistemas biológicos.*  
Fecha: 23 de octubre de 2007.

#### **4.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

**- Prof. Alejandro Toro-Labbé.**

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

*Flujo electrónico en reacciones químicas. Concepto y aplicaciones.*

Fecha: 11 de octubre de 2007.

**- Dr. Saïd Bouhelal.**

LMPMP Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif, Argelia.

*Control of the Microstructure of iPP and iPP/Nano-Clays by Reversible Crosslinking Reaction (RXR) in Reactive Extrusion (REX).*

Fecha: 5 de junio de 2007.

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

### **4.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

**José González Carmona.**

- International Center for Condensed Matter Physics, Universidad de Brasilia, Brasil, 2 a 13 de julio de 2007.

**Guillermo A. Mena Marugán.**

- Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 10 de junio a 2 de julio de 2007.

**José María Martín García**

- Universidad de Linköping, Suecia, 17 de abril a 3 de mayo de 2007.
- Universidad de Tübingen, Alemania, 8 a 15 de diciembre de 2007.

**Tomasz H. Pawlowski**

- Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Polonia, 20 de noviembre a 11 de diciembre de 2007.

**David Brizuela Cieza**

- Center for Computation and Technology, Louisiana State University, E.E.U.U., 8 de agosto a 29 de septiembre de 2007.

**Iñaki Garay Elizondo**

- Departamento de Física Teórica, Universidad de Varsovia, Polonia, 15 de septiembre a 15 de diciembre de 2007.

**Daniel Gómez Vergel**

- Institute for Theoretical Physics, Universidad de Utrecht, Holanda, 1 de septiembre a 15 de noviembre de 2007.

**Pablo Galán Sánchez**

- Friedrich-Schiller-Universität Jena, Alemania, 18 a 26 de agosto de 2007.

### **4.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

**Jorge Dukelsky Bercovich.**

- Universidad de Tennessee y ORN, E.E.U.U., 11 a 17 de febrero de 2007.
- Universidad de Indiana, E.E.U.U., 7 a 13 de octubre de 2007.

**Olof E. Tengblad.**

- TRIUMF, Canada's National Laboratory for Particle and Nuclear Physics, Vancouver, Canadá, 20 a 28 de octubre de 2007.

**Eduardo Garrido Bellido.**

- Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, Dinamarca, 4 a 10 de noviembre de 2007.

**Daniel Galaviz Redondo.**

- GSI, Darmstadt, y Universidad Tecnológica de Dresden, Alemania, 20 a 31 de marzo de 2007.

- GSI, Darmstadt, Alemania, 28 de mayo a 5 de junio de 2007.
- ATOMKI, Debrecen, Hungría, 10 a 17 de junio de 2007.
- GSI, Darmstadt, Alemania, 30 de julio a 15 de agosto de 2007.
- Michigan State University, Lansing, E.E.U.U., 16 a 23 de octubre de 2007.
- TRIUMF, Vancouver, Canadá, 23 a 30 de octubre de 2007.
- KVI, Groningen, Holanda, 6 a 12 de diciembre de 2007.

**Rafael Alejandro Molina Fernández.**

- Universidad de Houston, E.E.U.U., 24 de abril a 25 de mayo de 2007.

**Manuela Turrión Nieves.**

- ISOLDE, CERN, Ginebra, Suiza, 10 de febrero a 4 de marzo, 17 de abril a 31 de mayo, 10 de junio a 20 de julio, y 30 de julio a 31 de agosto de 2007.

**Aranzazu Maira Vidal.**

- Institut de Recherches Subatomiques, Estrasburgo, Francia, 21 de mayo a 1 de junio y 7 a 14 de diciembre de 2007.

**Martín Alcorta Moreno.**

- Michigan State University, E.E.U.U., 9 a 22 de abril de 2007.
- Tokyo Institute of Technology, Japón, 25 de mayo a 23 de junio de 2007.
- Aarhus University, Dinamarca, 12 de agosto a 15 de noviembre de 2007.

**Raúl de Diego Martínez.**

- Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Aarhus, Dinamarca, 10 de enero a 13 de abril de 2007.

**Beatriz Errea Subero.**

- Universidad Nacional de San Martín, Argentina, 3 de mayo a 3 de julio de 2007.

**Miguel Madurga Flores.**

- Joint Institute of Nuclear Astrophysics Special School, Michigan State University, E.E.U.U., 4 a 22 de abril de 2007.
- Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Dinamarca, 9 de septiembre a 16 de diciembre de 2007.

**Óscar Moreno Díaz.**

- Instituto de Tecnología de Tokio, Japón, 10 de mayo a 16 de Junio de 2007.
- Instituto Tecnológico de Massachussets (MIT), Boston, E.E.U.U., 6 de julio a 12 de septiembre de 2007.

### **4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

**Concepción Domingo Maroto.**

- Universidad de Florencia, Dipartimento di Chimica, Florencia, Italia, 4 a 10 de febrero de 2007.
- Universidad Autónoma de México, Insto. de Investigaciones Estéticas, México D.F., México, 11 a 24 de mayo de 2007.

**José M. Fernández Sánchez.**

- Universidad de Rennes I, Rennes, Francia, 11 a 18 de marzo de 2007.

**Juan Hernández Morilla.**

- Universidad Johann Wolfgang Goethe, Frankfurt, Alemania, 1 de octubre a 30 de noviembre de 2007.

**Beatriz Martín Llorente.**

- Department of Earth Sciences, University of Cambridge. Cambridge, Reino Unido, mayo y junio de 2007.

### **4.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

Los astrónomos del DAMIR han realizado decenas de viajes internacionales de gestión científica de grandes telescopios, proyectos de futuras instalaciones científicas, participación en tribunales de tesis, comités de evaluación de observatorios y otras instituciones.

**José Cernicharo Quintanilla.**

- Observatorio de Grenoble, Grenoble, Francia, 10 a 17 de junio de 2007.
- Observatorio de París. Comités del programa nacional francés PCMI. 3 a 12 de diciembre de 2007.

**Santiago Arribas Mocoroa.**

- Space Telescope Science Institute, E.E.U.U., 7 a 22 de julio de 2007.

**Luis Colina Robledo.**

- INAOE, Puebla, México, 22 a 29 de abril de 2007.

**María Luisa Senent Díez.**

- Universidad Autónoma Metropolitana de México, México, 22 de abril a 7 de mayo de 2007.
- Univ. Tunes El Manar, Túnez, 14 a 20 de mayo y 25 a 31 de octubre de 2007.
- Observatorio de París, París, Francia, 1 a 6 de octubre de 2007.
- Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile, Santiago, Chile, 11 a 23 de noviembre de 2007.
- Caltech Submillimeter Observatory, Hilo, Hawaii, E.E.U.U., 13 a 24 de diciembre de 2007.

**Francisco Najarro de la Parra.**

- Universidad de Munich, Munich, Alemania, 11 a 19 de octubre de 2007.
- Instituto de Astronomía de Hawaii, Honolulu, Hawaii, E.E.U.U., 3 a 17 de diciembre de 2007.

**Juan Ramón Pardo Carrión.**

- Observatorio de París, París, Francia, 28 de mayo a 5 de junio de 2007.
- Australian Telescope Nacional Facility (MOPRA), Narrabrai, Sydney, Australia, 20 de junio a 8 de julio de 2007.
- Caltech Submillimeter Observatory, Hilo, Hawaii, E.E.U.U., 13 a 24 de diciembre de 2007.

**Almudena Alonso Herrero.**

- University of Oxford, Oxford, Reino Unido, 5 a 11 de febrero de 2007.

**José Pablo Fonfría Expósito.**

- Benemérita Universidad de Puebla, Puebla, México, 1 de julio a 31 de diciembre de 2007.

**Eduardo Sánchez Suárez.**

- Space Research of the Netherlands (SRON), Groningen, Holanda, 26 de marzo a 4 de abril de 2007.
- Space Research of the Netherlands (SRON), Utrecht y Groningen, Holanda, 17 a 28 de septiembre de 2007.

**Marcelino Agúndez Chico.**

- Instituto de Radioastronomía Milimétrica, Grenoble, Francia, 29 de agosto a 31 de octubre de 2007.

**Tanio Díaz Santos.**

- University of Kentucky, Lexington, Kentucky, E.E.U.U., 22 de marzo a 26 de mayo de 2007.
- Benemérita Universidad de Puebla, Puebla, México, 22 a 29 de abril de 2007.

**Izaskun Jiménez Serra.**

- Universidad de Leeds, Reino Unido, 23 de octubre a 1 de noviembre 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, 2 a 9 de febrero de 2007.
- Universidad Nacional Autónoma de México, México, 11 a 24 de mayo de 2007.
- Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 28 de noviembre a 12 de diciembre de 2007.

**Santiago Sánchez-Cortés.**

- Instituto de Física de Sao Carlos, Universidad de Sao Paulo, Brasil, 1 a 8 mayo de 2007.

- Instituto para la Síntesis Orgánica y la Fotorreactividad, Consiglio Nazionale della Ricerca, CNR, Bolonia, Italia, 11 a 21 de noviembre de 2007.

**Magna Santos Greve.**

- Institute of Chemical Process Fundamentals, A.S.C.R., Praga, República Checa, 4 de junio a 10 de junio de 2007.

**Luca Guerrini.**

- Department of Proteomics, Institute for Analytical Sciences (ISAS), Dortmund (Alemania), 1 de octubre a 15 de noviembre de 2007.

**Zuzana Jurasekova.**

- Instituto para la Síntesis Orgánica y la Fotorreactividad, Consiglio Nazionale della Ricerca, CNR, Bolonia, Italia, 2 de abril a 3 de junio de 2007.

#### **4.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

**Francisco J. Baltá Calleja.**

- Universidad de Cleveland, E.E.U.U., 31 de marzo a 8 de abril de 2007.
- Universidad de Stony Brook, Nueva York, E.E.U.U., 8 a 16 de abril de 2007.
- Universidad de Hamburgo, Hamburgo, Alemania, 2 a 9 de mayo, 20 de mayo a 2 de junio y 10 a 17 de julio de 2007.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 16 a 22 de junio y 26 de octubre a 2 de noviembre de 2007.
- Instituto Max Planck, Potsdam, Alemania, 17 a 23 de julio de 2007.
- Instituto de Procesos Físico-Químicos (CNR), Messina, Italia, 6 al 13 de septiembre de 2007.
- Universidad de Sétif y Universidad de Bejaia, Argelia, 14 a 21 de octubre de 2007.

**Javier Martínez de Salazar Bascuñana.**

- Laboratorio de Química Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago, Chile, 20 de noviembre a 7 de diciembre de 2007.

**M<sup>a</sup> José Capitán Aranda.**

- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 23 de septiembre a 1 octubre de 2007.
- Sincrotrón sueco Lund, Suecia, 17 a 25 de junio de 2007.
- Paul Scherrer Institut (PSI), Villigen, Suiza, 30 de octubre a 6 de noviembre de 2007.

**Jaime J. Hernández Rueda.**

- Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK), Universidad de Freiburg, Friburgo, Alemania, 3 de septiembre a 29 de noviembre de 2007.

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



## **5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO**

### **5.1.1 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**

**M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.**

- Doctorado Interuniversitario en Física Nuclear con Mención de Calidad.  
**Física Nuclear Experimental** (4 créditos).

**M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge** y **Daniel Galaviz Redondo.**

- European Master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics, Universidad Complutense de Madrid.  
**Experimental Techniques in Plasmas, Nuclear Physics and Materials** (6 créditos).

**Francisco Javier Bermejo Barrera.**

- Doctorado en Física Computacional y Aplicada, UPC, Barcelona.  
**Correlaciones dinámicas en Materia Desordenada** (3 créditos).

**Eduardo Garrido Bellido.**

- Universidad Complutense de Madrid.  
**Sistemas de pocos cuerpos en Física Nuclear: núcleos con halo** (1 crédito).

**Pedro Sarriguren Suquilbide.**

- Universidad Complutense de Madrid.  
**Núcleos deformados. Modelo de Nilsson. Excitaciones Gamow-Teller** (3 créditos); junio 2007.  
**Núcleos deformados. Modelo de Nilsson. Excitaciones Gamow-Teller** (3 créditos); diciembre 2007.

**Olof E. Tengblad.**

- European Master on Nuclear Fusion Science and Engineering Physics, Universidad Complutense de Madrid/IEM-CSIC.  
**Laboratory Project** (6 créditos).
- Master de instrumentación nuclear básica, Universidad de Huelva.  
**Electrónica y adquisición de datos** (5 créditos).

**Rafael Alejandro Molina Fernández**

- Escuela de Doctorado de Física Nuclear, Universidad Complutense de Madrid.  
**Estructura Nuclear** (1 crédito).

**Armando Relaño Pérez**

- Escuela de doctorado de Física Nuclear, Universidad Complutense de Madrid.  
**Estructura Nuclear** (1 crédito).

### **5.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

**José Luis Doménech Martínez.**

- Universidad del País Vasco. Programa de doctorado interuniversitario “Láseres y espectroscopía avanzada en química” (QUIMILASER).  
**Instrumentación avanzada con láser** (3 créditos).

## 5.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA

**José Cernicharo Quintanilla.**

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

**DAMIR**

- Máster Astrocam

## 5.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

**José Vicente García Ramos.**

- Facultad de Ciencias, Universidad de Educación a Distancia.  
**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

**Guillermo A. Mena Marugán.**

- *The Quantum Gowdy Cosmologies*, Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 14 de junio de 2007.
- *Gravedad Cuántica y agujeros negros*, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas, Madrid, 16 de mayo de 2007.

**Tomasz H. Pawłowski.**

- *Mechanics of Higher Dimensional Black Holes in Asymptotically Anti-de Sitter Spacetimes*, Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Polonia, 5 de enero de 2007.
- *Loop Quantum Cosmology (Lecture Series)*, Spring School “The First Quantum Geometry and Quantum Gravity School”, Zakopane, Polonia, 22 a 25 de mayo de 2007.
- *Universe with Cosmological Constant in LQC*, Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Polonia, 30 de noviembre de 2007.

**Luis J. Garay Elizondo.**

- *Agujeros negros gravitatorios y acústicos*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 13 de noviembre de 2007.
- *Relatividad: espacio y tiempo*, Colegio Mayor Loyola, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 2007.
- *Quasinormal Modes in BEC Acoustic Black Holes*, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Madrid, 2007.

**David Brizuela Cieza**

- *High-Order Gauge-Invariant Perturbations of a Spherical Spacetime*, Center for Computation and Technology, Louisiana State University, Baton Rouge, E.E.U.U., septiembre de 2007.

**Iñaki Garay Elizondo**

- *Gravity, Symmetry and Quanta*, Institute of Theoretical Physics, Warsaw University, Polonia, 5 de octubre de 2007.

**Daniel Gómez Vergel**

- *Exact Quantization of Gowdy 3-Torus Models* (dos seminarios), Institute for Theoretical Physics, Utrecht University, Holanda, 13 y 27 de septiembre de 2007.

## 5.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

### **Francisco Javier Bermejo Barrera.**

- *La fuente europea de neutrones por espalación*, Sociedad Bascongada de Amigos del País, mayo de 2007.

### **Jorge Dukelsky Bercovich.**

- *Cooper Pairs in the Superconducting Medium*, Laboratorio Nacional de Oak Ridge, E.E.U.U., 8 de febrero de 2007.
- *Cooper Pairs in the Superfluid Medium: A View from the Exact Solution of the BCS Model*, Universidad de Bolonia, Italia, 18 de mayo de 2007.
- *Cooper Pairs, Pairing Correlations and Exactly Solvable Pairing Models*, Universidad de Indiana, E.E.U.U., 25 de octubre de 2007.

### **Pedro Sarriguren Suquilbide.**

- *Nuclear Beta-Decay from Microscopic Models*, IFIC, CSIC, Valencia, 18 de abril de 2007.

### **Olof E. Tengblad.**

- *Reactions with Relativistic Radioactive Beams: A Universal Setup for Kinematical Complete Measurements*, Universidad de Chalmers, Suecia, 18 de diciembre de 2007.

### **Carlos Cabrillo García.**

- *Mecánica Cuántica y procesado cuántico de la información para peatones II: el principio de superposición*, Agrupación Astronómica de Madrid, 12 de junio de 2007.

### **Daniel Galaviz Redondo.**

- *Nuclear Astrophysics along the Proton Rich Side*, Centro de Física Nuclear de la Universidad de Lisboa, Portugal, 8 de octubre de 2007.

### **Rafael Alejandro Molina Fernández.**

- *Numerical Estimation of Critical Parameters with the Bond Entropy*, Universidad de Karlsruhe, Alemania, 16 de abril de 2007.

### **Armando Relaño Pérez.**

- *Decoherencia en sistemas de espines*, Universidad de Sevilla, 13 de noviembre de 2007.

## 5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

### **Concepción Domingo Maroto.**

- *Aplicaciones de la espectroscopía vibracional a la conservación del Patrimonio Cultural*, en el “Curso de Conservación de Patrimonio II”, IRNASE (CSIC), Sevilla, 15 de marzo de 2007.
- *Superficies metálicas nanoestructuradas y su funcionalización para sensores moleculares basados en SERS y SEIRA*, en el Curso “Nuevos usos para viejos materiales y nuevos materiales para viejos usos” del Ciclo de Ciencia y Tecnología, Fundación General de la UCM, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 19 de abril de 2007.
- *Acciones de la UE relacionadas con Patrimonio Cultural*, Coordinación de Humanidades, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México D.F., 14 de mayo de 2007.
- *Aplicaciones de la espectroscopía vibracional a la conservación del Patrimonio Cultural*, Instituto de Investigaciones Estéticas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México D.F., 16 de mayo de 2007.
- *Aplicaciones de la Espectroscopía Raman al estudio de superficies*, en el Curso de Especialización de Postgrado del CSIC “Caracterización químico-física de la superficie de sólidos”, Jarandilla de la Vera (Cáceres), 6 de junio de 2007.
- *Espectroscopía Raman Resonante de nanotubos de carbono y materiales relacionados*, Universidad Pública de Navarra, 28 de junio de 2007.
- *Conservación del Patrimonio Artístico Español: estudio espectroscópico de vidrieras históricas*, Planetario de Pamplona, 28 de junio de 2007.

#### **Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga**

- *Hielos en la atmósfera terrestre y en el sistema solar*, Facultad de Química, Universidad de Valladolid, 9 de marzo de 2007.

#### **Isabel Tanarro Onrubia**

- *Plasmas fríos moleculares. Sistemas altamente reactivos a baja temperatura*, Ciclo de Conferencias del Instituto de Matemáticas y Física Fundamental, CSIC, 16 de Mayo de 2007.

### **5.2.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

#### **José Cernicharo Quintanilla.**

- *Transmisión atmosférica en la Antártida*, París, Francia, 26 de junio de 2007.

#### **Jesús Martín-Pintado Martín.**

- *Chemical Complexity as a Tracer of Nuclear Activity*, Universidad de Leeds, Reino Unido, 12 de diciembre de 2007.
- *La evolución del Universo y el origen de la vida*, Asociación de Astronomía "Ilatargi", Oñate, diciembre de 2007.

#### **María Luisa Senent Díez.**

- *Cadenas carbonadas*, Universidad Autónoma Metropolitana de México, México D.F., abril de 2007.
- *Química Teórica aplicada a la Astrofísica Molecular: cadenas carbonadas, tipo Cn*, Instituto de Física de la Benemérita Universidad de Puebla, Puebla, Méjico, abril de 2007.
- *La importancia de la Química Teórica en el Proyecto ALMA*, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Puebla, México, abril de 2007.
- *Spectroscopy of Molecules of Astrophysical Relevance*, Departamento de Física de la Universidad de Túnez El Manar, Túnez, mayo de 2007.
- *Cadenas carbonadas*, Facultad de Ecología y Recursos Naturales de la Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile, noviembre de 2007.

#### **Juan Ramón Pardo Carrión**

- *Atacama Large Millimeter Array: Radioastronomía en el siglo XXI*, Agrupación Astronómica de Madrid, 6 noviembre de 2007.
- *The Chemical Complexity of the Universe: Hunting for New Molecules*, en el Curso IRAM OBSERVING SCHOOL 2007 mm Observing in Times of HERSCHEL, Pradollano, 28 de septiembre a 5 de octubre de 2007.

#### **Almudena Alosó Herrero.**

- *Conferencia en el curso "Introducción a Cosmología: el origen y la evolución del Universo"*, Madrid, 1 de marzo de 2007.

#### **José Pablo Fonfría Expósito.**

- *Estructura y composición química de la envoltura de la estrella AGB IRC+10216*, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE), Puebla, México, 8 de agosto de 2007.
- *Determinación teórica de espectros moleculares de especies de interés astrofísico a partir de un conjunto pequeño de frecuencias experimentales*, Instituto de Física de la Benemérita Universidad de Puebla, Puebla, México, 26 de octubre de 2007.

#### **Helena Massó González.**

- *Moléculas de interés astrofísico: cadenas carbonadas y complejos de agua*, Leiden, Holanda, 10 de noviembre de 2007.

### **5.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

#### **José Vicente García Ramos.**

- *Espectroscopia Raman sobre nanoestructuras metálicas: SERS y SEIR*. Departamento de Física de la Materia Condensada y Cristalografía, Universidad de Valladolid, 13 de febrero de 2007.

- *Espectroscopía Raman sobre superficies metálicas nanoestructuradas (SERS) aplicada al estudio de pigmentos del Patrimonio Histórico Artístico*, Instituto de Investigaciones Estéticas, UNAM, México D. F., México, 15 de mayo de 2007.
- *Espectroscopía Raman sobre nanoestructuras metálicas: nuevos sustratos SERS y algunas aplicaciones*, Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, México D. F., México, 22 de mayo de 2007.
- *Herramientas espectroscópicas en la conservación del Patrimonio Artístico*, Centro Patrimonial Recoleta Dominica, Santiago, Chile, 4 de diciembre de 2007.
- *Espectroscopía en la interfase: nuevas tendencias en SERS, SEIRA y SEF*, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile, 6 de diciembre de 2007.

**José Antonio Sánchez Gil.**

- *Óptica de plasmones superficiales: nanoestructuras metálicas y microestructuras semiconductoras*, Departamento de Física, Universidad Pública de Navarra, 22 de mayo de 2007.
- *Surface Plasmon Scattering on Metal Nano-Structures*, Universidad Internacional Menéndez Pelayo, Santander, julio de 2007.

## **5.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

**Francisco J. Baltá Calleja.**

- *Nanostructure Characterization in Multilayered Polymer Systems Using X-Ray Scattering Methods and Microindentation Techniques*, Universidad de Cleveland, E.E.U.U., 3 de abril de 2007.
- *Micromechanical Properties of Polymer Materials Relating to Nanostructure Derived from SAXS*, Universidad de Cleveland, E.E.U.U., 5 de Abril de 2007.
- *Study of the Nanostructure of Immiscible Polymers Using USAXS: Effects of Confinement*, Universidad Stony Brook, Nueva York, E.E.U.U., 12 de abril de 2007.
- *Nanostructure Development during Crystallization of Polymers as Revealed by Microhardness: Influence of Aging and Annealing*, Universidad de Kassel, Alemania, 16 de mayo de 2007.
- *Micromechanical Properties and Nanostructure of Multilayered Polymer Systems*, Universidad de Kassel, Alemania, 18 de mayo de 2007.
- *Nanostructure Characterization in Multilayer Polymer System Using SAXS Methods*, Instituto Max Planck, Potsdam, Alemania, 18 de julio de 2007.
- *Micromechanical Properties of Polymeric Materials Relating to Nanostructural Parameters*, Universidad de Kaiserslautern, Alemania, 25 de julio de 2007.
- *Characterization of the Nanostructure in Multilayered Polymer Systems Using Synchrotron Radiation Techniques*, Instituto de Procesos Físico-Químicos (CNR), Messina, Italia, 12 de septiembre de 2007.
- *Micromechanical Properties of Polymers and Composite Materials Relating to Nanostructure Parameters*, Laboratoire des Matériaux Polymères Multiphasiques (LMPMP), Département de Génie des Procédés, Faculté des Sciences d'Ingénieur, Sétif, Argelia, 16 de octubre de 2007.
- *Micromechanical Properties of Polymers and Composite Materials Relating to Nanostructure Parameters*, Département de Génie des Procédés, Faculté des Sciences et des Sciences de l'Ingénieur, Université A. Mira- Béjaia, Argelia, 20 de octubre de 2007.

**Javier Martínez-Salazar Bascuñana.**

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

**Tiberio A. Ezquerro Sanz.**

- *Breve introducción a la física de los materiales poliméricos*, en el Curso “Nuevos usos para viejos materiales y nuevos materiales para viejos usos” del Ciclo de Ciencia y Tecnología, Fundación General de la UCM, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 16 a 19 de abril 2007.
- *Nanostructure of Polyester and Ether-Crown Polymer Thin Films*. Institut für Mikrosystemtechnik, University of Freiburg, Alemania, 2 de octubre de 2007.

**M<sup>a</sup> José Capitán Aranda.**

- *Uso de la radiación de sincrotrón en el análisis de superficies*, en el Curso “Crystallographic School”, Jaca, Huesca, 21 de octubre de 2007.

## **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 grafeno y nanotubos de carbono*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **Guillermo A. Mena Marugán.**

- *Cosmología cuántica de lazos*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **Jesús Fernando Barbero González.**

- *Relatividad General cuántica*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **José M. Martín García.**

- *Métodos computacionales en Relatividad General*, ciclo de seminarios del IEM, 4 de diciembre de 2007.

#### **Luis J. Garay Elizondo.**

- *Física de agujeros negros*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15 de noviembre de 2007.

#### **David Brizuela Cieza.**

- *Perturbaciones no lineales de espaciotiempos esféricos*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30 de mayo de 2007.

#### **Daniel Gómez Vergel**

- *Cosmología relativista*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24 de mayo de 2007.

### **5.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

#### **M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.**

- *El núcleo: Un viaje al centro de la materia*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 14 de noviembre de 2007.
- *MAGISOL (Madrid-Aarhus-Göteborg@ISOLDE(CERN))-Colaboration Meeting* (Organizadora), 18 a 19 enero de 2007.

#### **Pedro Sarrigurean Suquibide.**

- *Estructura Nuclear e interacciones electrodébiles*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **Olof E. Tengblad y Manuela Turrión Nieves (Organizadores).**

- *PANSI-3: Make EURONS Research Popular*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 a 14 de abril de 2007.

#### **Carlos Cabrillo García.**

- *La Física de la Materia Desordenada*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **Rafael Alejandro Molina Fernández.**

- *Dinámica y efectos de la interacción en sistemas cuánticos de muchos cuerpos*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 30 de marzo de 2007.

#### **Armando Relaño Pérez.**

- *Decoherencia en sistemas de espines*, ciclo de seminarios del IEM, 7 de noviembre de 2007.

**Raúl de Diego Martínez y Ricardo Domínguez Reyes.**

- *Aspectos teóricos y experimentales de la Física Nuclear*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 9 de octubre de 2007.

### **5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

**Víctor José Herrero Ruiz de Loizaga.**

- *Hielo en el Universo: de los glaciares al medio interestelar*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 5 de noviembre de 2007.

**Isabel Tanarro Onrubia.**

- *Los plasmas: de la aurora boreal al interior de una estrella, del tubo fluorescente al reactor de fusión*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 13 de noviembre de 2007.

**José Luis Doménech Martínez.**

- *¿Cómo ayuda la espectroscopía láser al estudio de las atmósferas?*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**José M. Fernández Sánchez.**

- *Espectroscopía Raman en chorros supersónicos*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Belén Maté Maya.**

- *IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia* (Organizador), 28 a 30 de marzo de 2007.
- *Física molecular de hielos atmosféricos y astrofísicos*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Juan Ortigoso Martínez.**

- *Control cuántico de procesos moleculares*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Isabel Méndez Sánchez.**

- *Estudio experimental y modelado cinético de plasmas fríos de H<sub>2</sub> y de sus mezclas con Ar, N<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 15 de noviembre de 2007.

### **5.3.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**José Cernicharo Quintanilla**

- *Astrofísica Molecular*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.
- *Workshop Herschel Open Time Key Program* (Miembro del SOC), Noordwijk, Holanda, 20 a 21 de febrero de 2007.
- *2º Workshop ASTROCAM: Jóvenes astrofísicos de la Comunidad de Madrid* (Miembro del SOC), Madrid, 19 a 21 de septiembre de 2007.
- *Molecules in Space and Laboratory* (Miembro del SOC), París, Francia, 13 a 16 de mayo de 2007.
- *Space Astronomy: The UV Window to the Universe* (Miembro del SOC), El Escorial (Madrid), 28 de mayo a 1 de junio de 2007.

**Jesús Martín Pintado Martín.**

- *Formación estelar: galáctica y extragaláctica*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.
- *Workshop ASTRID. Desarrollo de instrumentación astronómica: futuros retos científicos y tecnológicos* (Miembro del SOC), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 21 a 23 de mayo de 2007.
- *La evolución química del Universo y el origen de la vida*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 12 de noviembre de 2007.

**Santiago Arribas Mocoroa.**

- *Workshop ASTRID. Desarrollo de instrumentación astronómica: futuros retos científicos y tecnológicos* (Miembro del SOC), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 21 a 23 de mayo de 2007.
- *First Madrid Advanced School of Astrophysics and Cosmology* (Miembro del SOC), El Escorial (Madrid), 17 a 18 de diciembre de 2007.

**Luis Colina Robledo.**

- *Astronomical Spectroscopy and Virtual Observatory* (Miembro del SOC), El Escorial (Madrid), 20 a 22 de marzo de 2007.
- *Astrofísica extragaláctica*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.
- *Workshop ASTRID. Desarrollo de instrumentación astronómica: futuros retos científicos y tecnológicos* (Miembro del SOC y del comité organizador local), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 21 a 23 de mayo de 2007.
- *Space Astronomy: The UV Window to the Universe* (Comité organizador local), El Escorial (Madrid), 28 de mayo a 1 de junio de 2007.
- *El Telescopio Espacial James Webb: Una nueva frontera en la exploración del Universo*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 6 de noviembre de 2007.

**María Luisa Senent Díez.**

- *Aplicación de los métodos ab initio al estudio de sistemas moleculares de interés astrofísico*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.

**Francisco Najarro Parra.**

- *IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia* (Organizador), 28 a 30 de marzo de 2007.
- *Estrellas Masivas*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.
- *Las estrellas más masivas del universo*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 8 de noviembre de 2007.

**Juan Ramón Pardo Carrión.**

- *Moléculas en el espacio*, VII Semana de la Ciencia de la Comunidad de Madrid, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 8 de noviembre de 2007.

**Izaskun Jiménez Serra.**

- *Procesos de formación estelar: los casos de L1448-mm y Cepheus A HW2*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 18 de septiembre de 2007.

### **5.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

**Pedro Carmona Hernández.**

- *Aplicaciones biológicas de la Espectroscopía Vibracional*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Luis Díaz Sol.**

- *Fotodeposición y ablación con láseres de IR*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Santiago Sánchez Cortés.**

- *Espectroscopía sobre nanopartículas metálicas: hacia la detección de moléculas aisladas*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**José A. Sánchez Gil.**

- *Fototónica de plasmones superficiales en nanoestructuras metálicas*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 28 de marzo de 2007.

**Luca Guerrini.**

- *Espectroscopía SERS (Surface-Enhanced Raman Spectroscopy): hacia la detección de moléculas aisladas*, Ciclo de Seminarios de Doctorandos y Postgraduados, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 20 de junio de 2007.

### **5.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

**Javier Martínez de Salazar Bascuñana, Javier Ramos Díaz y Víctor L. Cruz Cañas** (Organizadores).

- *Workshop High Performance Computing in Molecular Simulation*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 19 de abril de 2007.

**Javier Martínez de Salazar Bascuñana, Javier Ramos Díaz y Juan Fco. Vega Borrego** (Organizadores).

- *Primer encuentro sobre poliolefinas de arquitectura controlada (EPAC I)*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 18 de octubre de 2007.

**Tiberio A. Ezquerro Sanz, M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez, Marian Gómez, Aurora Nogales Ruiz** (Organizadores)

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

**Víctor Cruz Cañas.**

- *Simulación de procesos físico-químicos mediante hipercomputación*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.

**Araceli Flores Aguilar-Amat.**

- *Creando sistemas poliméricos nanolaminares: una ruta hacia la bidimensionalidad*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.

**Juan Francisco Vega Borrego.**

- *Reología y topología molecular de polietilenos obtenidos mediante catalizadores de centro activo único*, Instituto de Estructura de la Materia (CSIC)/URJC, 7 de febrero de 2007.
- *Las macromoléculas en movimiento: de la reptación al flujo*, seminario dentro del IV Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 29 de marzo de 2007.

**Jaime J. Hernández Rueda.**

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

## **5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS**

### **5.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

**José González Carmona.**

- Miembro del Comité Científico del congreso internacional *Nanoscience and Nanotechnology 2007*, Frascati (Italia).

**Pablo Galán Sánchez.**

- Premio Extraordinario de Doctorado en Física 2007, Universidad Autónoma de Madrid.  
Director de la Tesis: **Guillermo A. Mena Marugán.**

### **5.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

**M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge.**

- Miembro del *International Advisory Committee of PROCON'07, International Conference on Proton Emitting Nuclei and Related Topics*, Lisboa, Portugal, 17 a 22 de junio de 2007.

**Francisco Javier Bermejo Barrera.**

- Miembro de la Comisión Ejecutiva de *ESS-Bilbao Initiative*.
- Miembro del *International Advisory Board "Conferences on Liquid and Amorphous Metals"*.

**Carlos Cabrillo García.**

- Miembro del Consejo Científico del Instituto Laue Langevin (ILL, Grenoble), *Colegio 6*, “Estructura y dinámica líquidos”.
- Miembro del Comité Científico del Congreso *FisEs '08*.

**Elvira Moya de Guerra.**

- Presidente de la Comisión Nacional de Evaluación de la Actividad Investigadora (CNEAI) de Física y Matemáticas.
- Vicepresidente de la Comisión Nacional de Acreditación de Catedráticos de Universidad en el Área de Ciencias.
- Miembro de la Comisión de Selección del Premio Nacional de Física y Ciencia de Materiales “Blas Cabrera”.

### **5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

**Rafael Escribano Torres.**

- Miembro del Comité Científico del congreso internacional *Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy*.
- Miembro del Comité Científico del congreso internacional *International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Columbus, Ohio (E.E.U.U.).

**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).
- Presidenta de la Sociedad Española de Óptica (SEDOPTICA).
- Miembro del Consejo General de la Confederación de Sociedades Científicas de España (COSCE).
- Representante española en la Acción COST D42 (Programa *Chemistry and Molecular Sciences and Technologies, CSMT*), titulada *Chemical Interactions between Cultural Artefacts and Indoor Environment (EnviArt)*.
- Representante española en la Acción COST MP0603 (Programa *Materials, Physical and Nanosciences, MPNS*), titulada *Chemical Imaging by means of CARS-Microscopy (MicroCARS)*.
- Miembro del Comité Editorial de la Revista *Óptica Pura y Aplicada*.

**Víctor J. Herrero Ruiz de Loizaga.**

- Miembro de la Comisión de Expertos (Química) del Ministerio de Educación y Ciencia.
- Secretario de la Asociación Alexander von Humboldt de España.
- Colaborador Honorífico de la Universidad Complutense de Madrid, Dpto. de Química Física de la UCM.

**Isabel Tanarro Onrubia.**

- Colaboradora Honorífica de la Universidad Complutense de Madrid, Dpto. de Química Física de la UCM.

### **5.4.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

**José Cernicharo Quintanilla.**

- Miembro del panel *Physics and Engineering Sciences* de los *Starting Grants* del ERC.
- Miembro del panel de evaluación de proyectos del *Infrared Process and Analysis Center (IPAC)* (NASA).
- Miembro del panel de evaluación de los contratos Ramón y Cajal y Juan De La Cierva.
- Según el Science Citation Index, uno de los 17 científicos españoles más citados.

**Luis Colina Robledo.**

- Miembro del *EURO-VO Science Advisory Committee* (ESA/ESO).
- Miembro del *MIRI Science Working Group* (NASA/ESA).

### **5.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

**Juana Bellanato Fontecha.**

- Insignia de Oro y Brillantes de la Asociación de Químicos de Madrid-Anque, noviembre de 2007.

- Miembro del *International Advisory Committee* de la IX *International Conference on Molecular Spectroscopy*. Wroclaw, Ladek Zdrój (Polonia), 12 a 16 de septiembre de 2007.

#### **5.4.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

##### **Francisco J. Baltá Calleja.**

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

##### **Javier Martínez de Salazar Bascuñana.**

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

##### **Tiberio A. Ezquerro Sanz.**

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

##### **Víctor Cruz Cañas y Javier Ramos Díaz.**

- Tesis de **Sonia Martínez Hedo** (Directores): 2º Premio del GEP (Grupo Especializado en Polímeros) a las mejores tesis doctorales en polímeros 2005-2006.

##### **Mª Cruz García Gutiérrez.**

- Miembro de la Junta Directiva de AUSE (Asociación de Usuarios de Sincrotrón de España), desde julio de 2007.

### **5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA**

#### **5.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

##### **Contratos de Transferencia Tecnológica:**

##### **Francisco Javier Bermejo Barrera.**

Empresa: Contrato de Fabricación adjudicado a SWISSLAN (Elgoibar).

Finalidad: Fabricación de un pre-moderador de neutrones producidos por espalación en la Segunda Estación de Blanco de la Fuente ISIS.

Duración: 5 meses.

##### **Francisco Javier Bermejo Barrera.**

Empresa: Contrato de Fabricación adjudicado a ElyTT Energy (Madrid).

Finalidad: Fabricación de un sistema de transporte de haz a baja energía (LEBT) destinado al nuevo inyector de protones de la Fuente ISIS.

Duración: 5 meses.

#### **5.5.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

##### **Informe de transferencia tecnológica:**

##### **Concepción Domingo Maroto.**

*Caracterización de nanofibras de carbono mediante espectroscopía Raman*, dentro del Proyecto “Modelo físico-químico de la absorción y desorción del hidrógeno en el coroneno” (CENIM, ICMM, IEM, UNED).

Empresa: **HYNERGREEN (ABENGOA)** (mayo de 2007).

#### **5.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

El DAMIR ha desarrollado el Programa ATM en el contexto de un contrato con el ESO para la calibración de las observaciones de ALMA. Este programa analiza la propagación de ondas electromagnéticas hasta 2000 GHz.

#### **5.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

##### **Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto:**

Ponente: Javier Martínez-Salazar Bascañana.

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

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Víctor Cruz Cañas.

Título: *Evaluación de la reactividad de catalizadores bis(imino)piridina de hierro (II).*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de marzo de 2007.

Ponente: Víctor Cruz Cañas

Título: *Interacción de hidrógeno molecular con catalizadores bis(imino)piridina de hierro.*

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

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

Colaboración: **IEM/Dow Chemicals.**

Lugar: Dow Chemicals, Tarragona.

Fecha: 9 de marzo de 2007.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.

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

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

Ponente: Javier Ramos Díaz.

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

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de marzo de 2007.

Ponente: Jon Otegui de la Fuente.

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

Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**

Lugar: Repsol YPF, Madrid.

Fecha: 25 de junio de 2007.

##### **Informes de transferencia tecnológica:**

Amelia Linares Dos Santos, José C. Canalda Cámara, Esperanza Cagliao Escohotado, Jaime J. Hernández Rueda, M<sup>a</sup> Cruz García-Gutiérrez y Tiberio A. Ezquerro Sanz.

*Composites basados en poliamida 12/nanofibras de carbono preparados mediante polimerización "in situ".*

Empresa: **Grupo ANTOLÍN Ingeniería S.A.** (diciembre de 2007).

Jon Otegui de la Fuente, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascañana.  
*Caracterización de polímeros bimodales a partir de sus componentes.*  
Empresa: **Repsol YPF** (julio de 2007).

Nuria Robledo Álvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascañana.  
*Study of the Relationships between Solid-State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low-Density Polyethylene and Other Polyolefins. On the Effect of the Interphase.*  
Empresa: **Dow Chemicals** (marzo de 2007).

## **5.6 UNIDADES ASOCIADAS**

### **5.6.2 DPTO. FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

- Unidad Asociada “Grupo de Investigación de Estructura de la Materia” entre el IEM, CSIC (responsable M<sup>a</sup> José G<sup>a</sup> Borge) y el Dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Huelva (responsable Ismael Martel Bravo), aprobada en junio de 2005 y vigente hasta junio de 2008. Solicitada la prórroga en 2007.
- Unidad Asociada “Grupo de Investigación de Física Nuclear” entre el IEM, CSIC (responsable, Pedro Sarriguren) y el Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad Complutense de Madrid (responsable Elvira Moya de Guerra), aprobada en 2007.
- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Jorge Dukelsky Bercovich) y el Dpto. de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla (responsable Joaquín Gómez Camacho), aprobada en mayo de 2007 y vigente hasta mayo de 2010.
- Unidad Asociada “Grupo de Física Aplicable” entre el IEM, CSIC (responsable Fco. Javier Bermejo Barrera) y el Dpto. de Electricidad y Electrónica de la Universidad del País Vasco (responsable José Manuel Barandiarán), aprobada prórroga en diciembre 2005 y vigente hasta diciembre 2008.

### **5.6.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

- Unidad Asociada “Química Física Molecular” entre el IEM, CSIC (responsable Víctor J. Herrero) y el Dpto de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid (responsable F. J. Aoiz), renovada por el periodo 2006-2009.
- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable Rafael Escribano) y el Dpto de Química Física y Analítica, Universidad de Jaén (responsable M. Fernández), renovada por el periodo 2007-2010.

### **5.6.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable J. V. García Ramos) y el Dpto. de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía, Universidad de Valladolid (responsable J. A. De Saja).
- Unidad Asociada entre el IEM, CSIC (responsable J. V. García Ramos) y el Grupo de Espectroscopía y Estructura Molecular del Dpto. de Química Física, Universidad de Málaga (responsable J. C. Otero).



**CAPÍTULO 6**  
**PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN**  
**CIENTÍFICA**



## 6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS ISI

### 6.1.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS

- 1 J. F. Barbero G., D. Gómez Vergel y E. J. S. Villaseñor.  
*Hamiltonian Dynamics of Linearly Polarized Gowdy Models Coupled to Massless Scalar Fields.*  
Classical and Quantum Gravity **24**, 5945 (2007).
- 2 C. Barceló, A. Cano, L. J. Garay y G. Jannes.  
*Quasi-Normal Mode Analysis in BEC Acoustic Black Holes.*  
Physical Review D **75**, 084024[7 págs.] (2007).
- 3 S. Bellucci, J. González, F. Guinea, P. Onorato y E. Perfetto.  
*Magnetic Field Effects in Carbon Nanotubes.*  
Journal of Physics: Condensed Matter **19**, 395017 (2007).
- 4 D. Brizuela, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.  
*Higher-Order Gauge-Invariant Perturbations of a Spherical Spacetime.*  
Physical Review D **76**, 024004[12 págs.] (2007).
- 5 A. Corichi, J. Cortez, G. A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.  
*Quantum Gowdy T3 Model: Schrödinger Representation with Unitary Dynamics.*  
Physical Review D **76**, 124031[12 págs.] (2007).
- 6 J. Cortez, G. A. Mena Marugán y J. M. Velhinho.  
*Uniqueness of the Fock Quantization of the Gowdy T3 Model.*  
Physical Review D **75**, 084027[14 págs.] (2007).
- 7 P. Galán y G. A. Mena Marugán.  
*Canonical Realizations of Doubly Special Relativity.*  
International Journal of Modern Physics D **16**, 1133-1147 (2007).
- 8 P. Galán, L. J. Garay y G. A. Mena Marugán.  
*Quantum Time Uncertainty in Schwarzschild-anti-de Sitter Black Holes.*  
Physical Review D **76**, 044014[10 págs.] (2007).
- 9 J. González y E. Perfetto.  
*Cooper-Pair Propagation and Superconducting Correlations in Graphene.*  
Physical Review B **76**, 155404 (2007).
- 10 J. M. Martín-García, R. Portugal y L. Manssur.  
*The Invar Tensor Package.*  
Computer Physics Communications **177**, 640-648 (2007).
- 11 E. Perfetto y J. González.  
*Superconductivity in Multi-Walled Carbon Nanotubes and Doped Graphite.*  
Physica C **460-462**, 1039 (2007).
- 12 E. Perfetto, J. González, F. Guinea, S. Bellucci y P. Onorato.  
*Quantum Hall Effect in Carbon Nanotubes and Curved Graphene Strips.*  
Physical Review B **76**, 125430 (2007).

### 6.1.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA

- 13 R. Álvarez Rodríguez, E. Garrido, A. S. Jensen, D. V. Fedorov y H. O. U. Fynbo.  
*Structure of Low-Lying  $^{12}\text{C}$ -resonances.*  
European Physical Journal A **31**, 303-317 (2007).

- 14 R. Álvarez Rodríguez, A. S. Jensen, D.V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y E. Garrido.  
*Energy Distributions from Three-body Decaying Many-body Resonances.*  
Physical Review Letters **99**, 072503 (2007).
- 15 N. Antonov, M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov y E. Moya de Guerra.  
*Superscaling in Dilute Fermi Gas and Its Relation to General Properties of the Nucleon Momentum Distribution.*  
Physical Review C **75**, 034319 (2007).
- 16 N. Antonov, M. V. Ivanov, M. B. Barbaro, J. A. Caballero, E. Moya de Guerra y M. K. Gaidarov.  
*Superscaling and Neutral Current Quasielastic Neutrino-Nucleus Scattering Beyond the Relativistic Fermi Gas Mode.*  
Physical Review C **75**, 064617 (2007).
- 17 J. M. Arias, J. E. García-Ramos, J. Dukelsky y J. Vidal.  
*Two-Level Interacting Boson Models beyond the Mean Field.*  
Physical Review C **75**, 14301 (2007).
- 18 J. M. Barandiarán, F.J. Bermejo, J. Gutierrez et al.  
*Spin Disorder in Fe-Doped Manganites.*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 757-762 (2007).
- 19 F.J. Bermejo, R. Fernández-Perea y C. Cabrillo.  
*Uncommon Features in the Dynamic Structure Factor of a Molten Transition Metal.*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 3113-3121 (2007).
- 20 F.J. Bermejo, R. Fernández-Perea, C. Cabrillo et al.  
*Stochastic Dynamics in Liquid Potassium as Explored by Polarized Neutron Scattering*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 3129-3133 (2007).
- 21 G.J. Cuello, R. Fernández-Perea, F.J. Bermejo et al.  
*Structure of Fe-Ni and Fe-Ni-S Molten Alloys by Neutron Diffraction*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 2987-2992 (2007).
- 22 F.J. Bermejo, R. Fernández-Perea, C. Cabrillo et al.  
*Quantitative Evaluation of the Effects of Positional versus Orientational Disorder on the Scattering of Acoustic Phonons in Disordered Matter.*  
Low Temperature Physics **33**, 606-611 (2007).
- 23 F. J. Bermejo, R. Fernández-Perea y A V. Krivchikov.  
*Comments on "Crystal-Like Nature of Acoustic Excitations in Glassy Ethanol".*  
Physical Review Letters **98**, 229601 (2007).
- 24 M. J. G. Borge, M. Alcorta, H. O. U. Fynbo, G. García, H. B. Jeppesen, O. Kirsebom, M. Madurga, G. Nyman, D. Obradors y O. Tengblad.  
*Mapping of the  $^{12}\text{C}^*$  States via the  $^{10}\text{B}(\beta\text{He}, p\alpha\alpha\alpha)$  Reaction.*  
European Physical Journal Special Topics **150**, 207-210 (2007).
- 25 R. Boutami, M. J. G. 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.  
*Structure of  $^{231}\text{Ra}$ : Measurements of Level Half-Lives.*  
European Physical Journal Special Topics **150**, 87-88 (2007).
- 26 I. Bustinduy, F. J. Bermejo, T. G. Perring et al.  
*Experimental Neutron Spectroscopy Data Visualization: Adaptive Tessellation Algorithm.*  
Review of Scientific Instruments **78**, 043901 (2007).
- 27 E. M. Darwish, C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra y J. M. Udías.  
*Helicity Dependence and Contribution to the GDH Sum Rule of the ( $\gamma$ -d to  $\pi$  NN) Reaction Channels in the Energy Region from Threshold up to the Delta(1232)-Resonance.*  
Physical Review C **76**, 044005.1-13 (2007).

- 28 R. de Diego, E. Garrido, D. V. Fedorov y A. S. Jensen.  
*Neutron-<sup>3</sup>H Potentials and the <sup>5</sup>H-properties.*  
Nuclear Physics A **786**, 71-89 (2007).
- 29 J. Dukelsky, B. Errea, S. Lerma H. y S. Pittel.  
*Exactly Solvable Pairing Hamiltonians.*  
International Journal of Modern Physics E **16**, 210 (2007).
- 30 G. G. Dussel, S. Pittel, J. Dukelsky y P. Sarriguren.  
*Cooper Pairs in Atomic Nuclei.*  
Physical Review C **76**, 011302.1-5 (R) (2007).
- 31 D. Escrig, A. M. Sánchez Benítez, A. M. Moro, M. A. G. Álvarez, M. V. Andrés, C. Angulo, M. J. G. Borge, J. Cabrera, J. Cabrera, S. Cherubini, P. Demaret, J. M. Espino, P. Figuera, M. Freer, J. E. García-Ramos, J. Gómez-Camacho, M. Gulino, O. R. Kakuee, I. Martel, C. Metelko, F. Pérez-Bernal, J. Rahighi, K. Rusek, D. Smirnov, O. Tengblad, P. Van Duppen y V. Ziman.  
*Alpha-Particle Production in the Scattering of <sup>6</sup>He by <sup>208</sup>Pb at Energies around the Coulomb Barrier.*  
Nuclear Physics A **792**, 2-17 (2007).
- 32 F. Fernández-Alonso, S. E. McLain, J. W. Taylor et al.  
*Correlated Atomic Motions in Liquid Deuterium Fluoride Studied by Coherent Quasielastic Neutron Scattering.*  
Journal of Chemical Physics **126**, 234509 (2007).
- 33 F. Fernández-Alonso, F. J. Bermejo, C. Cabrillo et al.  
*Nature of the Bound States of Molecular Hydrogen in Carbon Nanohorns.*  
Physical Review Letters **98**, 215503 (2007).
- 34 F. Fernández-Alonso, F. J. Bermejo, S. E. McLain et al.  
*Observation of Fractional Stokes-Einstein Behavior in the Simplest Hydrogen-Bonded Liquid.*  
Physical Review Letters **98**, 077801 (2007).
- 35 C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra, y J. M. Udías.  
*Analysis of the Quadrupole Deformation of Delta(1232) within an Effective Lagrangian Model for Pion Photoproduction from the Nucleon.*  
European Physical Journal A **31**, 572-574 (2007).
- 36 C. Fernández-Ramírez, E. Moya de Guerra, y J. M. Udías.  
*Eta Photoproduction as a Test of the Extended Chiral Symmetry.*  
Physics Letters. B **651**, 369-373 (2007).
- 37 C. Fernández-Ramírez y A. Relaño.  
*Spectral-Fluctuations Test of the Quark-Model Baryon Spectrum.*  
Physical Review Letters **98**, 062001.1-4 (2007).
- 38 E. Garrido, D. V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y A. S. Jensen.  
*Energy Distributions of Charged Particles from Three-Body Decay.*  
Nuclear Physics A **781**, 387-406 (2007).
- 39 E. Garrido, D.V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y A. S. Jensen.  
*Isospin Mixing and Energy Distributions in Three-Body Decay.*  
Physics Letters B **648**, 274-278 (2007).
- 40 E. Garrido, D. V. Fedorov, A. S. Jensen y H. O. U. Fynbo.  
*Resonances in Three-Body Systems with Short and Long-Range Interactions.*  
Nuclear Physics A **790**, 96-102 (2007).
- 41 M. A. González, C. Mondelli, C. Cabrillo, R. Fernández-Perea, F. J. Bermejo, F. Albergamo, E. Enciso, C. Carbajo y M. J. Torralvo.  
*Study of the Effects of Confinement in the Collective Excitations of Liquid Deuterium.*  
European Physical Journal-Special Topics **141**, 35-38 (2007).

- 42 J. Gutiérrez, J. M. Barandiarán, F. J. Bermejo et al.  
*Evidence for Two Disparate Spin Dynamic Regimes within Fe-Substituted  $\text{La}_{0.7}\text{Pb}_{0.3}(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) Colossal Magnetoresistive Manganites: Neutron Spin-Echo Measurements.*  
Physical Review B **76**, 184401 (2007).
- 43 S. Jensen, D. V. Fedorov, R. Álvarez Rodríguez y E. Garrido.  
*Efimov Effect and Three-Body Decay.*  
Nuclear Physics A **787**, 553-560 (2007).
- 44 O. Kavatsyuk, C. Mazzocchi, Z. Janas, A. Banu, L. Batist, F. Becker, A. Blazhev, W. Bruchle, J. Doring, T. Faestermann, M. Gorska, H. Grawe, A. Jungclaus, M. Karny, M. Kavatsyuk, O. Klepper, R. Kirchner, M. La Commara, K. Miernik, I. Mukha, C. Plettner, A. Plochocki, E. Roeckl, M. Romoli, K. Rykaczewski, M. Schadel, K. Schmidt, R. Schwengner y J. Zylicz.  
*Beta Decay of  $\text{Sn-101}$ .*  
European Physical Journal A **31**, 319-325 (2007).
- 45 A. I. Krivchikov, A. N. Yushchenko, O. A. Korolyuk et al.  
*Anomaly in Temperature Dependence of Thermal Transport of Two Hydrogen-Bonded Glass-Forming Liquids.*  
Physical Review B **75**, 214204 (2007).
- 46 S. Lerma H., B. Errea, J. Dukelsky y W. Satula.  
*Exact Solution of the Spin-Isospin Proton-Neutron Pairing Hamiltonian.*  
Physical Review Letters **99**, 032501 (2007).
- 47 S. Lerma H. y B. Errea.  
 *$SU(3)$  Richardson-Gaudin Models: Three-Level System.*  
Journal Physics A **40**, 4125 (2007).
- 48 K. V. Lukyanov, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, A. N. Antonov y M. K. Gaidarov.  
*Calculations of  $6\text{He}+p$  Elastic Scattering Cross Sections Using Folding and High-Energy Approximation.*  
European Physical Journal A **33**, 389 (2007).
- 49 H. Mach, L. M. Fraile, O. Arndt, A. Blazev, N. Boelaert, M. J. G. Borge, R. Boutami, H. Bradley, N. Braun, Z. Dlouhy, C. Fransen, H. O. U. Fynbo, A. Gargano, Ch. Hinke, P. Hoff, A. Joinet, A. Jokinen, J. Jolie, U. Köster, A. Korgul, K.-L. Kratz, T. Kröll, W. Kurcewicz, J. Nyberg, E.-M. Reillo, E. Ruchowska, W. Schwerdtfeger, G. S. Simpson, M. Stanoiu, O. Tengblad, P. G. Thirolf, V. Ugryumov y W. B. Walters.  
*The Single-Particle and Collective Features in the Nuclei just above  $^{132}\text{Sn}$ .*  
Acta Physica Polonica B **38**, 1213-1218 (2007).
- 50 M. Madurga, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager y O. Tengblad.  
*Multiple Particle Break-Up Study of Low Excited States in  $9\text{Be}$ : The Ghost Peak in the  $^8\text{Be}$  Excitation Energy Spectrum Visited.*  
European Physical Journal-Special Topics **150**, L137-138 (2007).
- 51 R. A. Molina y P. Schmitteckert.  
*Numerical Estimation of Critical Parameters Using the Bond Entropy.*  
Physical Review B **75**, 235104 (2007).
- 52 R. A. Molina, P. Schmitteckert y J. Dukelsky.  
*Commensurability Effects for Fermionic Atoms Trapped in 1D Optical Lattices.*  
Physical Review Letters **99**, 080404 (2007).
- 53 R. A. Molina, J. Retamosa, L. Muñoz, A. Relaño y E. Faleiro.  
*Power Spectrum of Nuclear Spectra with Missing Levels and Mixed Symmetries.*  
Physics Letters B **644**, 25 (2007).
- 54 M. Moro, F. M. Nunes, D. Escrig y J. Gómez-Camacho.  
*Three-Body Approaches for Inclusive Breakup Reactions.*  
Nuclear Physics A **787** 463C-470C (2007).

- 55 L. C. Pardo, J. L. Tamarit, N. Veglio et al.  
*Comparison of Short-Range-Order in Liquid- and Rotator-Phase States of a Simple Molecular Liquid: A Reverse Monte Carlo and Molecular Dynamics Analysis of Neutron Diffraction Data.*  
Physical Review B **76**, 134203 (2007).
- 56 L. C. Pardo, F. J. Bermejo, J. L. Tamarit et al.  
*Structural Changes across the Glass-Transition in a Glassy-Crystal.*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 999-1001 (2007).
- 57 C. Pascual-Izarra, N. P. Barradas, NP, M. A. Reis, C. Jeynes, M. Menu, B. Lavedrine, J. Jacques Ezrati y S. Rohrs.  
*Towards Truly Simultaneous PIXE and RBS Analysis of Layered Objects in Cultural Heritage.*  
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms **261**, 426-429 (2007).
- 58 M. A. Reis, N. P. Barradas, C. Pascual-Izarra, P. C. Chaves, A. R. Ramos, E. Alves, G. González-Aguilar, M. E. V. Costa e I. M. M. Salvado.  
*Holistic RBS-PIXE Data Reanalysis of SBT Thin Film Samples.*  
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms **261**, 439-442 (2007).
- 59 A. Relaño, J. Dukelky y R. A. Molina.  
*Decoherence Induced by an Interacting Spin Environment in the Transition from Integrability to Chaos.*  
Physical Review E **76**, 046223 (2007).
- 60 R. Rodríguez-Guzmán y P. Sarriguren.  
*E(5) and X(5) Shape Phase Transitions within a Skyrme Hartree-Fock+BCS Approach.*  
Physical Review C **76**, 064303.1-8 (2007).
- 61 M. D. Ruiz-Martín, M. Jiménez-Ruiz, A. Stunault et al.  
*Stochastic Dynamics in Molten Potassium Explored by Polarized Quasielastic Neutron Scattering.*  
Physical Review B **76**, 174201 (2007).
- 62 M. D. Ruiz-Martín, M. Jiménez-Ruiz, M. Plazanet et al.  
*Microscopic Dynamics in Molten Ni: Experimental Scrutiny of Embedded-Atom-Potential Simulations.*  
Physical Review B **75**, 224202 (2007).
- 63 M. D Ruiz-Martín, M. Jiménez-Ruiz, F.J. Bermejo et al.  
*Microscopic Collective Dynamics in Liquid Tellurium.*  
Journal of Non-Crystalline Solids **353**, 1005-1007 (2007).
- 64 P. Sarriguren, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra y A. N. Antonov.  
*Nuclear Skin Emergence in Skyrme Deformed Hartree-Fock Calculations.*  
Physical Review C **76**, 044322.1-14 (2007).
- 65 H. Simon, M. Meister, T. Aumann, M. J. G. Borge, L. V. Chulkov, U. Datta Pramanik, Th. W. Elze, H. Emling, C. Forssén, H. Geissel, M. Hellström, B. Jonson, J. V. Kratz, R. Kulesa, Y. Leifels, K. Markenroth, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, V. Pribora, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, O. Tengblad y M. V. Zhukov.  
*Systematic Investigation of the Drip-Line Nuclei  $^{11}\text{Li}$  and  $^{14}\text{Be}$  and Their Unbound Subsystems  $^{10}\text{Li}$  and  $^{13}\text{Be}$ .*  
Nuclear Physics A **791**, 267 (2007).
- 66 E. R. White, H. Mach, L. M. Fraile, O. Arndt, A. Blazev, N. Boelaert, M. J. G. Borge, R. Boutami, H. Bradley, N. Braun, B. A. Brown, P. A. Butler, A. Covello, Z. Dlouhy, C. Fransen, H. O. U. Fynbo, Ch. Hinke, P. Hoff, A. Joinet, A. Jokinen, J. Jolie, U. Köster, A. Korgul, K.-L. Kratz, T. Kröll, W. Kurcewicz, J. Nyberg, E.-M. Reillo, E. Ruchowska, W. Schwerdtfeger, G. S. Simpson, M. Stanoiu, O. Tengblad, P. G. Thirolf, V. Ugryumov y W. B. Walters.  
*Lifetime Measurement of the 167.1 keV State in  $^{41}\text{Ar}$ .*  
Physical Review C **76**, 057303-1-4 (2007).

### 6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

- 67 F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. P. de Miranda y V. Sáez Rábanos.  
*Constraints at the Transition State of the D+H<sub>2</sub> Reaction: Quantum Bottlenecks vs Stereodynamics.*  
Physical Chemistry Chemical Physics **9**, 5367 (2007).
- 68 V. Boudon, D. Radhouani, M. Loete, R. Z. Martínez y D. Bermejo.  
*High-Resolution Stimulated Raman Spectroscopy and Analysis of the  $\nu(1)$  Stretching Band of GeD<sub>4</sub>.*  
Journal of Raman Spectroscopy **38**, 559-562 (2007).
- 69 T. G. Elizarova, A. A. Khokhlov, y S. Montero.  
*Numerical Simulation of Shock Wave Structure in Nitrogen.*  
Physics of Fluids **19**, 068102 (2007).
- 70 R. Escribano, D. Fernández-Torre, V. J. Herrero, B. Martín-Llorente, B. Maté, I. K. Ortega y H. Grothe.  
*The Low-frequency Raman and IR Spectra of Nitric Acid Hydrates.*  
Vibrational Spectroscopy **43**, 254 (2007).
- 71 O. Gálvez.  
*Synoptic-Scale Transport of Ozone into Southern Ontario.*  
Atmospheric Environment **41/38**, 8579-8595 (2007).
- 72 O. Gálvez y P. C. Gómez.  
*An Ab Initio Study on the Structure and Energetics of the ClO Hydrates.*  
Chemical Physics Letters **448**, 16-23 (2007).
- 73 O. Gálvez, I. K. Ortega, B. Maté, M. A. Moreno, V. J. Herrero, R. Escribano y P. J. Gutiérrez.  
*A Study of the Interaction of CO<sub>2</sub> with Water Ice.*  
Astronomy & Astrophysics **472**, 691 (2007).
- 74 L. Gómez, R. Z. Martínez, D. Bermejo, F. Thibault, P. Joubert, B. Honvault-Bussery y J. Bonamy.  
*Q-Branch Line Widths of N<sub>2</sub> Perturbed by H<sub>2</sub>: Experiments and Quantum Calculations from Ab Initio Potential.*  
Journal of Chemical Physics **126**, 204302 (2007).
- 75 F. J. Gordillo-Vázquez, V. J. Herrero e I. Tanarro.  
*From Carbon Nanostructures to New Photoluminescence Sources: An Overview of New Perspectives and Emerging Applications of Low Pressure PECVD.* Review.  
Chemical Vapor Deposition **13**, 267-279 (2007).
- 76 S. Montero.  
*The Mathematical Culture of Spain.*  
Arbor-Ciencia Pensamiento y Cultura **183**, 721-738 (2007).
- 77 I. Tanarro.  
*Comment on "Effects of Hydrogen Dilution on Deposition Process of Nano-Crystalline Silicon Film by SiCl<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> Plasma".*  
Journal of Physics D: Applied Physics **40**, 2994-2995 (2007).
- 78 I. Tanarro, V. J. Herrero, A. M. Islyaikin, I. Méndez, F. L. Tabarés y D. Tafalla.  
*Ion Chemistry in Cold Plasmas of H<sub>2</sub> with CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>.*  
Journal of Physical Chemistry A **111**, 9003-9012 (2007).
- 79 H. Tran, D. Bermejo, J. L. Domenech, P. Joubert, R. R. Gamache y J. M. Hartmann.  
*Collisional Parameters of H<sub>2</sub>O Lines: Velocity Effects on the Line-Shape.*  
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **108**, 126-145 (2007).

### PUBLICACIÓN CONJUNTA CON EL DAMIR

- 80 J. P. Fonfría, A. Ramos, F. Thibault, G. Tejeda, J. M. Fernández y S. Montero

*Inelastic Collisions in Molecular Nitrogen at Low Temperature ( $2 < T < 50$  K).*  
Journal of Chemical Physics **127**, 134305-1-10 (2007).

### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM**

- 81 M. V. Cañamares, J. V. García-Ramos, J. D. Gómez-Varga, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.  
*Ag Nanoparticles Prepared by Laser Photoreduction as Substrates for “in situ” Surface-Enhanced Raman Scattering Analysis of Dyes.*  
Langmuir **23**, 5210-5215 (2007).
- 82 C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.  
*Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles as Substrates for Surface Enhanced Vibrational Spectroscopy.*  
Journal of Physical Chemistry C **111**, 8149-8152 (2007).
- 83 M. C. García-Gutierrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte y T. A. Ezquerra.  
*X-Ray Microdiffraction and Micro-Raman Study on an Injection Moulding SWCNT-Polymer Nanocomposite.*  
Composites Science and Technology **67**, 798-805 (2007).  
**(Conjunta también con el Dpto. de FMM)**
- 84 L. Guerrini, Z. Jurasekova, C. Domingo, M. Pérez-Méndez, P. Leyton, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
*Importance of Metal-Adsorbate Interactions for the Surface-Enhanced Raman Scattering of Molecules Adsorbed on Plasmonic Nanoparticles.*  
Plasmonics **2**, 147-156 (2007).
- 85 P. Leyton, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, M. Campos-Vallette, G. Díaz F. y J. V. García-Ramos.  
*Reflection-Absorption IR and Surface-Enhanced IR of Tetracarboethoxy *t*-Butyl-Calix[4]arene, a Host Molecule with Potential Applications in Sensor Devices.*  
Vibrational Spectroscopy **43**, 358-365 (2007).

### **PUBLICACIÓN CONJUNTA CON EL DPTO. DE FMM**

- 86 J. Otegui, J. F. Vega, S. Martín, V. Cruz, A. Flores, C. Domingo y J. Martínez-Salazar.  
*The Unit Cell Expansion of Branched Polyethylene as Detected by Raman Spectroscopy: An Experimental and Simulation Approach.*  
Journal of Materials Science **42**, 1046–1049 (2007).

### **6.1.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

- 87 M. Agúndez, J. Cernicharo y M. Guélin.  
*Discovery of Phosphathyne (HCP) in Space: Phosphorus Chemistry in Circumstellar Envelopes.*  
Astrophysical Journal **662**, L91-L94 (2007).
- 88 A. Alberdi, L. Colina, M. J. Torrelles, N. Panagia, A. S. Wilson y S. T. Garrington.  
*Evolution of the Circumnuclear Radio Supernova SN 2000ft in NGC 7469.*  
Astrophysical Journal **654**, 1176 (2007).
- 89 V. Bujarrabal y J. R. Pardo.  
*Molecules in (Proto)Planetary Nebulae.*  
Baltic Astronomy **16**, 126-133 (2007).
- 90 H. M. Butner, S. B. Charnley, C. Ceccarelli, S. D. Rodgers, J. R. Pardo, B. Parise, J. Cernicharo y G. R. Davis.  
*Discovery of Interstellar Heavy Water.*  
Astrophysical Journal **659**, L137-L140 (2007).
- 91 J. Cernicharo, M. Guélin, M. Agúndez, K. Kawaguchi, M. McCarthy y P. Thaddeus.  
*Astronomical Detection of  $C_4H^-$ , the Second Interstellar Anion.*  
Astronomy and Astrophysics **467**, L37-L40 (2007).

- 92 J. Cernicharo, E. Polehampton y J. R. Goicoechea.  
*Far-Infrared Detection of  $H_2D^+$  toward Sgr B2.*  
*Astrophysical Journal* **657**, L21-L24 (2007).
- 93 L. Colina, T. Díaz-Santos, A. Alonso-Herrero, N. Panagia, A. Alberdi, J.M. Torrelles y A. S. Wilson.  
*Optical Detection of the Radio Supernova SN 2000ft in the Circumnuclear Region of the Luminous Infrared Galaxy NGC 7469.*  
*Astronomy & Astrophysics* **467**, 559-564 (2007).
- 94 C. Comito, P. Schilke, U. Endesfelder, I. Jiménez-Serra y J. Martín-Pintado.  
*High-Resolution Study of a Star-Forming Cluster in the Cepheus A HW2 Region.*  
*Astronomy & Astrophysics* **469**, 207-211 (2007).
- 95 F. Daniel, J. Cernicharo, E. Roueff, M. Gerin y M. L. Dubernet.  
*The Excitation of  $N_2H^+$  in Interstellar Molecular Clouds. II. Observations.*  
*Astrophysical Journal* **667**, 980-1001 (2007).
- 96 B. Davies, D. F. Figer, R.-P. Kudritzki, J. MacKenty, F. Najarro y A. Herrero.  
*A Massive Cluster of Red Supergiants at the Base of the Scutum-Crux.*  
*Astrophysical Journal* **671**, 781-801 (2007).
- 97 J.-F. Desmurs, J. Alcolea, V. Bujarrabal, C. Sánchez-Contreras y F. Colomer.  
*Water Vapor and Silicon Monoxide Maser Observations in the Protoplanetary Nebula OH231.8+4.2.*  
*Astronomy & Astrophysics* **468**, 189-192 (2007).
- 98 K. Demyk, H. Mäder, B. Tercero, J. Cernicharo, J. Demaison, L. Margulès, M. Wegner, S. Keipert y M. Sheng.  
*Isotopic Ethyl Cyanide  $^{13}CH_3CH_2CN$ ,  $CH_3^{13}CH_2CN$ , and  $CH_3CH_2^{13}CN$ : Laboratory Rotational Spectrum and Detection in Orion.*  
*Astronomy & Astrophysics* **466**, 255-259 (2007).
- 99 T. Díaz-Santos, A. Alonso-Herrero, L. Colina, S. D. Ryder y J.H. Knapen.  
*Resolving the Stellar Populations in the Circumnuclear Ring of NGC 7469.*  
*Astrophysical Journal* **661**, 149-164 (2007).
- 100 J. L. Donley, G. H. Rieke, P. G. Pérez-González, J. R. Rigby y A. Alonso-Herrero.  
*Spitzer Power-Law Active Galactic Nucleus Candidates in the Chandra Deep Field-North.*  
*Astrophysical Journal* **660**, 167-190 (2007).
- 101 J. Graciá-Carpio, P. Planesas y L. Colina.  
*Sub-Arcsecond CO(1-0) and CO(2-1) Observations of the Ultraluminous Infrared Galaxy IRAS 10190+1322.*  
*Astronomy & Astrophysics* **468**, L67-L70 (2007).
- 102 B. García, S. Gonzalez, F. J. Hoyuelos, S. Ibeas, J. M. Leal, M. L. Senent, T. Biver, F. Secco y M. Venturini.  
*Thermodynamics and Kinetics of the Nickel II- Salicylhydroxamic Acid System. Phenol Rotation Induced by Metal Ion Binding.*  
*Inorganic Chemistry* **46**, 3680-3687 (2007).
- 103 B. García, F. Secco, S. Ibeas, A. Muñoz, F. J. Hoyuelos, J. M. Leal, M. L. Senent y M. Venturini.  
*Structural NMR and Ab Initio Study of Salicylhydroxamic and p-Hydroxybenzohydroxamic Acids: Evidence for an Extended Aggregation.*  
*Journal of Organic Chemistry* **72**, 7832-7840 (2007).
- 104 M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero, E. Mediavilla.  
*Integral Field Spectroscopy of the Luminous Infrared Galaxy ARP 299 (IC 694 + NGC 3690).*  
*Astrophysical Journal* **654**, 696 (2007).
- 105 A. Gil de Paz, B. F. Madore, S. Boissier, D. Thilker, L. Bianchi, C. Sánchez Contreras y otros 18 co-autores.  
*Chemical and Photometric Evolution of Extended Ultraviolet Disks: Optical Spectroscopy of M83 (NGC 5236) and NGC 4625.*

- Astrophysical Journal **661**, 115-134 (2007).
- 106 M. Guélin, P. Salomé, R. Neri, S. García-Burillo, J. Graciá-Carpio, J. Cernicharo, P. Cox, P. Planesas, P. M. Solomon, L. J. Tacconi y P. vanden Bout.  
*Detection of HNC and Tentative Detection of CN at  $z=3.9$ .*  
Astronomy & Astrophysics **462**, L45-L48 (2007).
- 107 I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, A. Rodríguez-Franco, C. Chandler, C. Comito y P. Schilke.  
*A Photoevaporating Rotating Disk in the Cepheus A HW2 Star Cluster.*  
Astrophysical Journal **661**, L187-L190 (2007).
- 108 S. S. Kim, D. F. Figer, R. P. Kudritzki y F. Najarro.  
*The Arches Cluster Mass Function.*  
Journal of the Korean Astronomical Society **40**, 153-155 (2007).
- 109 A. Labiano, P. D. Barthel, C. P. O'Dea, W. H. de Vries, I. Pérez y S. A. Baum.  
*GPS Radio Sources: New Optical Observations and an Updated Master List.*  
Astronomy & Astrophysics **463**, 97-U10.
- 110 B. Lefloch, J. Cernicharo, B. Reipurth, J. R. Pardo y R. Neri.  
*Anatomy of HH 111 from CO Observations: A Bow-Shock-Driven Molecular Out.*  
Astrophysical Journal **658**, 498-508 (2007).
- 111 F. Lique, M. L. Senent, A. Spielfiedel y N. Feautrie.  
*Rotationally Inelastic Collisions of SO with H<sub>2</sub>: Potential Energy Surface and Rate Coefficients for Excitation by para-H<sub>2</sub> at Low Temperatures.*  
Journal of Chemical Physics **126**, 164312 (2007).
- 112 N. Marcelino, J. Cernicharo, M. Agúndez, E. Roueff, M. Gerin, J. Martín-Pintado, R. Mauersberger y C. Thum.  
*Discovery of Interstellar Propylene (CH<sub>2</sub>CHCH<sub>3</sub>): Missing Links in Interstellar Gas-Phase Chemistry.*  
Astrophysical Journal **665**, L127-L130 (2007). Nature **448**, 843 (2007) (Research Highlights).
- 113 H. Massó, V. Veryazov, P.-Å. Malmqvist, B. O. Roos y M. L. Senent.  
*Ab Initio Characterization of the C<sub>5</sub>.*  
Journal of Chemical Physics **127**, 154318 (2007).
- 114 I. Meirold-Mautner, C. Prigent, E. Defier, J. R. Pardo, J. P. Chaboureau, J. P. Pinty, M. Mech y S. Crewell.  
*Radiative Transfer Simulations Using Mesoscale Cloud Model Outputs: Comparisons with Passive Microwave and Infrared Satellite Observations for Midlatitudes.*  
Journal of the Atmospheric Sciences **64**, 1550-1568 (2007).
- 115 M. R. Mokiem, A. de Koter, J. S. Vink, J. Puls, C. J. Evans, S. J. Smartt, P. A. Crowther, A. Herrero y otros 4 co-autores.  
*The Empirical Metallicity Dependence of the Mass-Loss Rate of O- and Early B-Type Stars.*  
Astronomy & Astrophysics **473**, 603-614 (2007).
- 116 M. R. Mokiem, A. de Koter, C. J. Evans, J. Puls, S. J. Smartt, P. A. Crowther, A. Herrero, N. Langer, D. L. Lennon, F. Najarro y otros 2 co-autores.  
*The VLT-FLAMES Survey of Massive Stars: Wind Properties and Evolution of Hot Massive Stars in the Large Magellanic Cloud.*  
Astronomy & Astrophysics **465**, 1003-1019 (2007).
- 117 A. Monreal-Ibero, L. Colina, S. Arribas y M. García-Marín.  
*Search for Tidal Dwarf Galaxy Candidates in a Sample of Ultraluminous Infrared Galaxies.*  
Astronomy & Astrophysics **472**, 421-433 (2007).
- 118 J. R. Pardo.  
*Millimeter Wave Survey of the Protoplanetary Nebula CRL 618 and Its Complete Model.*  
Baltic Astronomy **16**, 123-125 (2007).

- 119 J. R. Pardo y J. Cernicharo.  
*Molecular Abundances in CRL 618.*  
Astrophysical Journal **654**, 978-987 (2007).
- 120 J. R. Pardo, J. Cernicharo, J. R. Goicoechea, M. Guélin y A. Asensio Ramos.  
*Molecular Line Survey of CRL 618 from 80 to 276 GHz and Complete.*  
Astrophysical Journal **661**, 250-261 (2007).
- 121 G. Pastorini, A. Marconi, A. Capetti, D. J. Axon, A. Alonso-Herrero y otros 10 co-autores.  
*Supermassive Black Holes in the Sbc Spiral Galaxies NGC 3310, NGC 4303 and NGC 4258.*  
Astronomy & Astrophysics **469**, 405-423 (2007).
- 122 E. T. Polehampton, J.-P. Baluteau, B. M. Swinyard, J. R. Goicoechea, J. M. Brown, G. J. White, J. Cernicharo y T.W. Grundy.  
*The ISO LWS High-Resolution Spectral Survey towards Sagittarius B2.*  
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society **377**, 1122-1150 (2007).
- 123 M. A. Requena-Torres, N. Marcelino, I. Jiménez-Serra, J. Martín-Pintado, S. Martín y R. Mauersberger.  
*Organic Chemistry in the Dark Clouds L1448 and L183: A Unique Grain Mantle Composition.*  
Astrophysical Journal **655**, L37-L40 (2007).
- 124 R. Sahai, M. Morris, C. Sánchez-Contreras y M. Claussen.  
*Preplanetary Nebulae: A Hubble Space Telescope Imaging Survey and a New Morphological Classification System*  
Astronomical Journal **134**, 2200-2225 (2007).
- 125 R. Sahai, C. Sánchez-Contreras, M. Morris y M. Claussen.  
*A Quadrupolar Preplanetary Nebula: IRAS 19475+3119.*  
Astrophysical Journal **658**, 410-422 (2007).
- 126 C. Sánchez-Contreras, D. Le Mignant, R. Sahai; A. Gil de Paz, M. Morris.  
*Adaptive Optics Imaging of IRAS 18276-1431: A Bipolar Preplanetary Nebula with Circumstellar "Searchlight Beams" and "Arcs".*  
Astrophysical Journal **656**, 1150-1166 (2007).
- 127 M. L. Senent, H. Massó y M. Hochla.  
*Anharmonic Spectroscopic Study of the Ground Electronic State of Various C<sub>4</sub> Radical Isotopomers, f.*  
Astrophysical Journal **670**, 1510 (2007).
- 128 A. Spielfiedel, N. Feautrier, C. Balanca, F. Dayou, F. Lique y M. L. Senent.  
*Molecules as Diagnostic Tools in the Interstellar Medium.*  
Molecular Physics **105**, 1263-1269 (2007).
- 129 A. Usero, S. García-Burillo, J. Martín-Pintado, A. Fuente y R. Neri.  
*Large-Scale Molecular Shocks in Galaxies.*  
New Astronomy Reviews **51**, 75-79 (2007).
- 130 M. Villa, M. L. Senent y R. Domínguez-Gómez.  
*ZPVE Correction to the FIR Spectrum to the Propanal Isotopomers.*  
Chemical Physics Letters **436**, 15-18 (2007).
- 131 L. F. M. Vincent, A. Spielfiedel y F. Lique.  
*Rotational Excitation of SiS Molecules by Collisions with He Atoms.*  
Astronomy & Astrophysics **472**, 1037-1040 (2007).
- 132 J. Woodall, M. Agúndez, A. J. Markwick-Kemper y T. J. Millar.  
*The UMIST Database for Astrochemistry 2006.*  
Astronomy & Astrophysics **466**, 1197-1204 (2007).

## **PUBLICACIÓN CONJUNTA CON EL DPTO. DE FM**

J. P. Fonfría, A. Ramos, F. Thibault, G. Tejeda, J. M. Fernández y S. Montero  
*Inelastic Collisions in Molecular Nitrogen at Low Temperature ( $2 < T < 50$  K).*  
Journal of Chemical Physics **127**, 134305-1-10 (2007).

### **6.1.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

- 133 F. Barroso-Bujans, J. L. G. Fierro, S. Rojas, S. Sánchez-Cortés, M. Arroyo y M. A. López-Manchado.  
*Degree of Functionalization of Carbon Nanofibers with Benzenesulfonic Groups in an Acid Medium.*  
Carbon **45**, 1669-1678 (2007).
- 134 G. P. Blanch, M. L. Ruiz del Castillo, M. M. Caja, M. Pérez-Méndez y S. Sánchez-Cortés.  
*Stabilization of All-Trans-Lycopene from Tomato by Encapsulation Using Cyclodextrins.*  
Food Chemistry **105**, 1335-1341 (2007).
- 135 J. J. Camacho, L. Díaz, M. Santos y J. L. M. Poyato.  
*Laser Induced Breakdown Spectroscopy of Trisilane Using IR CO<sub>2</sub> Laser Pulses.*  
Journal of Applied Physics **102**, 103302 (2007).
- 136 J. J. Camacho, J. M. L. Poyato, L. Díaz y M. Santos.  
*Optical Emission Studies of Nitrogen Plasmas Generated by CO<sub>2</sub> Laser Pulses.*  
Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **40**, 4573-4590 (2007).
- 137 L. Díaz, M. Santos, y J. Pola.  
*Gas-Phase Formation of SiSe in IR Laser-co-Decomposition of Dimethyl Selenide and 1,3-Disilacyclo-Butane.*  
Journal of Organometallic Chemistry **692**, 3841-3845 (2007).
- 138 S. Gaspard, M. Oujda, E. Rebollar, M. Walczar, L. Díaz-Sol, M. Santos y M. Castillejo.  
*IR Laser Ablation of Doped Poly(Methyl Methacrylate).*  
Applied Surface Science **253**, 6442-6446 (2007).
- 139 V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. R. Méndez.  
*Collective Electromagnetic Emission from Molecular Layer on Metal Nanostructures Mediated by Surface Plasmons.*  
Physical Review B **75**, 235447 (2007).  
Seleccionado para Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology.
- 140 V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos y E. R. Méndez.  
*Electromagnetic Model and Calculations of the Surface-Enhanced Raman-Shifted Emission from Langmuir-Blodgett Films on Metal Nanostructures.*  
Journal of Chemical Physics **127**, 044702 (2007).
- 141 V. Giannini y J. A. Sánchez-Gil.  
*Calculations of Light Scattering from Isolated and Interacting Metallic Nanowires with Arbitrary Cross Section by means of Green's Theorem Surface Integral Equations in Parametric Form.*  
Journal of the Optical Society of America A **24**, 2822-2830 (2007).
- 142 B. D. Howes, L. Guerrini, S. Sánchez-Cortés, M. P. Marzocchi, J. V. García-Ramos y G. Smulevich.  
*The Influence of pH and Anions on the Adsorption Mechanism of Rifampicin on Silver Colloids.*  
Journal of Raman Spectroscopy **38**, 859-864 (2007).
- 143 M. Kuttge, H. Kurz, J. Gómez Rivas, J. A. Sánchez-Gil y P. Haring Bolivar.  
*Analysis of the Propagation of THz Surface Plasmon Polaritons on Semiconductor Groove Gratings.*  
Journal of Applied Physics **101**, 023707 (2007).
- 144 M. R. López-Ramírez, J. V. García-Ramos, J. C. Otero, J. L. Castro y S. Sánchez-Cortés.  
*Tuning Charge-Transfer Processes in the Surface-Enhanced Raman Scattering of L- $\alpha$ -Phenylglycine Adsorbed on Silver Nanostructures.*

- Chemical Physics Letters **446**, 380-384 (2007).
- 145 O. L. Muskens, V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil y J. Gómez Rivas.  
*Strong Enhancement of the Radiative Decay Rate of Emitters by Single Plasmonic Nanoantennas.*  
Nano Letters **7**, 2871-2875 (2007).
- 146 O. L. Muskens, J. Gómez Rivas, V. Giannini y J. A. Sánchez-Gil.  
*Optical Scattering Resonances of Single Plasmonic Nanoantennas.*  
Optics Express **15**, 17736-17746 (2007).
- 147 A. Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.  
*Spectroscopic Study of Conformational Changes Accompanying Self-Assembly of HCV Core Protein.*  
Proteins-Structure, Function and Bioinformatics **66**, 110-117 (2007).
- 148 A. Rodríguez-Casado, P. Carmona, P. Moreno, I. Sánchez-González, A. Macagnano, C. Di Natale y M. Careche.  
*Structural Changes in Sardine (*Sardina Pilchardus*) Muscle During Iced Storage: Investigation by DRIFT Spectroscopy.*  
Food Chemistry **103**, 1024-1030 (2007).
- 149 A. Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.  
*Biomolecular Interactions in HCV Nucleocapsid-like Particles as Revealed by Vibrational Spectroscopy.*  
Journal of Molecular Structure **834-836**, 81-85 (2007).
- 150 A. Rodríguez-Casado, I. Alvarez, A. Toledano, E. De Miguel y P. Carmona.  
*Amphetamine Effects on Brain Protein Structure and Oxidative Stress as Revealed by FTIR Microspectroscopy.*  
Biopolymers **86**, 437-446 (2007).
- 151 A. Rodríguez-Casado, M. Molina y P. Carmona.  
*Core Protein-Nucleic Acid Interaction in HCV as Revealed by Raman and CD Spectroscopy.*  
Applied Spectroscopy **61**, 1219-1224 (2007).
- 152 J. A. Sánchez-Gil.  
*Distributed Feedback Gratings for Surface-Plasmon Polaritons Based on Metal Nano-Groove/Ridge Arrays.*  
Optics Letters **32**, 2330-2332 (2007).
- 153 M. Santos, L. Díaz, M. Urbanová, Z. Bastl, J. Subrt y J. Pola.  
*IR Laser-Induced Co-Deposition of Dimethyl Selenide and Trisilane: Gas-Phase Formation of SiSe and Chemical Vapour Deposition of Nanostructured H/Si/Se/C Polymers.*  
Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry **188**, 399-408 (2007).
- 154 P. Sevilla, J. M. Rivas, F. García-Blanco, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
*Identification of the Anti Tumoral Drug Emodin Binding Sites in Bovine Serum Albumin by Spectroscopic Methods.*  
Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics **1774**, 1359-1369 (2007).

### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM**

M. V. Cañamares, J. V. García-Ramos, J. D. Gómez-Varga, C. Domingo y S. Sánchez-Cortés.  
*Ag Nanoparticles Prepared by Laser Photoreduction as Substrates for "in situ" Surface-Enhanced Raman Scattering Analysis of Dyes.*  
Langmuir **23**, 5210-5215 (2007).

C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, J. V. García-Ramos, V. Resta y J. Gonzalo.  
*Pulsed Laser Deposited Au Nanoparticles as Substrates for Surface Enhanced Vibrational Spectroscopy.*  
Journal of Physical Chemistry C **111**, 8149-8152 (2007).

M. C. García-Gutierrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte y T. A. Ezquerria.

*X-Ray Microdiffraction and Micro-Raman Study on an Injection Moulding SWCNT-Polymer Nanocomposite.*

Composites Science and Technology **67**, 798-805 (2007).

**(Conjunta también con el Dpto. de FMM)**

L. Guerrini, Z. Jurasekova, C. Domingo, M. Pérez-Méndez, P. Leyton, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.

*Importance of Metal-Adsorbate Interactions for the Surface-Enhanced Raman Scattering of Molecules Adsorbed on Plasmonic Nanoparticles.*

Plasmonics **2**, 147-156 (2007).

P. Leyton, C. Domingo, S. Sánchez-Cortés, M. Campos-Vallette, G. Díaz F. y J. V. García-Ramos.

*Reflection-Absorption IR and Surface-Enhanced IR of Tetracarboethoxy *t*-Butyl-Calix[4]arene, a Host Molecule with Potential Applications in Sensor Devices.*

Vibrational Spectroscopy **43**, 358-365 (2007).

## **6.1.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

155 F. J. Baltá Calleja, G. Di Marco, A. Flores y M. Pieruccini.

*Confinement-Induced Vitrification in Polyethylene Terephthalate.*

Physical Review B **75**, 224201 (2007).

156 R. K. Bayer y F. J. Baltá-Calleja.

*Nanostructure of Potato Starch. II. Structure of a Highly Crystalline Gel Obtained by Retrogradation Using X-Ray Diffraction Techniques.*

Journal of Applied Polymer Science **104**, 689-696 (2007).

157 S. Bouhelal, M. E. Cagiao, D. Benachour y F. J. Baltá Calleja.

*Structure Modification of Isotactic Polypropylene through Chemical Crosslinking: Toughening Mechanism.*

Journal of Applied Polymer Science **103**, 2968-2976 (2007).

158 M. E. Cagiao, A. O. Pozdnyakov, M. Krumova, V. V. Kudryavtsev y F. J. Baltá Calleja.

*Nanostructure Evolution during Thermal Treatment of Polyimide-Fullerene Composites as Revealed by WAXS and SAXS.*

Composites Science and Technology **67**, 2175-2182 (2007).

159 M. E. Cagiao, A. O. Pozdnyakov, M. Krumova, V. V. Kudryavtsev y F. J. Baltá Calleja.

*Thermal Imidization of Polyamic Acid-Fullerene Composites: "In situ" X-Ray Diffraction Study.*

Composite Interfaces **14**, 199-213 (2007).

160 M. J. Cánovas, I. Sobrados, J. Sanz, T. A. Ezquerro y A. Linares.

*NMR and Electrical Conductivity Studies of Poly(2,6-Dimethyl-1,4-Phenyleneoxide) Ionomers.*

Solid State Ionics **178**, 1049-1057 (2007).

161 V. Compan, F.J. Fernández-Carretero, E. Riande, A. Linares y J. L. Acosta.

*Electrochemical Properties of Ion-Exchange Membranes Based on Sulfonated EPDM-Polypropylene Blends.*

Journal of the Electrochemical Society **154**, B159-B164 (2007).

162 V. L. Cruz, S. Martínez, J. Martínez-Salazar, D. Polo-Cerón, S. Gómez-Ruiz, M. Fajardo y S. Prashar.

*3D-QSAR Study of Ansa-Metallocene Catalytic Behavior in Ethylene Polymerization.*

Polymer **48**, 4663-4674 (2007).

163 V. L. Cruz, S. Martínez, J. Martínez-Salazar y J. Sancho.

*Proposed Polymerization Termination Mechanism for 3-R-Indenyl ansa-Zirconocenes (R=n-Alkyl) Based on DFT Calculations and Experimental Observations.*

Macromolecules **40**, 7413-7415 (2007).

164 V. L. Cruz, J. Martínez, J. Martínez-Salazar, J. Ramos, M. L. Reyes, A. Toro-Labbe y S. Gutiérrez-Oliva.

*QSAR Model for Ethylene Polymerisation Catalysed by Supported Bis(imino)pyridine Iron Complexes.*

- Polymer **48**, 7672-7678 (2007).
- 165 M. T. Expósito, J. F. Vega y J. Martínez-Salazar.  
*Molecular Structure and Properties of Ethylene-Co-Styrene Polymers Obtained from [Norbornane-7,7-Bis(indenil)]Titanium Dichloride Catalyst System.*  
Journal of Applied Polymer Science **106**, 1421-1430 (2007).
- 166 J. J. Hernández, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, A. Sanz, I. Sics, B. S. Hsiao, Z. Roslaniec, G. Broza y T. A. Ezquerra.  
*Deformation Behaviour during Cold Drawing of Nanocomposites Based on Single Wall Carbon Nanotubes and Poly(Ether Ester) Copolymers.*  
Polymer **48**, 3286-3293 (2007).
- 167 G. Kim, G. H. Michler, F. Ania y F. J. Baltá Calleja.  
*Temperature Dependence of Polymorphism in Electrospun Nanofibres of PA6 and PA6/Clay Nanocomposite.*  
Polymer **48**, 4814-4823 (2007).
- 168 A. Linares, A. Nogales, D. R. Rueda y T. A. Ezquerra.  
*Molecular Dynamics in PVDF/PVA Blends as Revealed by Dielectric Loss Spectroscopy.*  
Journal of Polymer Science Part B-Polymer Physics **45**, 653 (2007).
- 169 S. Martínez, K. Morokuma y D. G. Musaev.  
*Mechanistic Aspects of Dinitrogen Hydrogenation Catalyzed by the Geometry-Constrained Zirconium and Titanium Complexes: Computational Studies.*  
Organometallics **26**, 5978-5986 (2007).
- 170 C. Navío, J. Álvarez, M. J. Capitán, D. Ecija, J. M. Gallego, F. Ynduráin y R. Miranda.  
*Electronic Structure of Ultrathin Gamma'-Fe4N(100) Films Epitaxially Grown on Cu(100).*  
Physical Review B **75**, 125422 (2007).
- 171 C. Navío, M. J. Capitán, J. Álvarez, F. Ynduráin y R. Miranda.  
*Intrinsic Surface Band Bending in Cu3N(100) Ultrathin Films.*  
Physical Review B **76**, 085105 (2007).
- 172 A. Nogales, D. R. Rueda, A. Sanz, M. C. García-Gutiérrez, T. A. Ezquerra, M. G. Zolotukhin, M. Del Carmen y H. M. Colquhoun.  
*Characterization of the Layered Structure in Main Chain Dibenzo-18-Crown-6 Ether Polymers by Simultaneous WAXS/MAXS-SAXS/DSC Measurements.*  
Macromolecules **40**, 3355-3360 (2007).
- 173 M. Pieruccini, T. A. Ezquerra y M. Lanza.  
*Phenomenological Model for the Confined Dynamics in Semicrystalline Polymers: The Multiple Alpha Relaxation in Cold-Crystallized PET.*  
Journal of Chemical Physics **127**, 104903 (2007).
- 174 W. Pisula, M. Kastler, B. El Hamaoui, M. C. García-Gutiérrez, R. J. Davies, C. Riekel y K. Müllen.  
*Dendritic Morphology in Homeotropically Aligned Discotic Films.*  
CHEMPHYSICHEM **8**, 1025-1028 (2007).
- 175 J. Ramos, L. D. Peristeras y D. N. Theodorou.  
*Monte Carlo Simulation of Short Chain Branched Polyolefins in the Molten State.*  
Macromolecules **40**, 9640-9650 (2007).
- 176 D. R. Rueda, A. Nogales, J. J. Hernández, M. C. García-Gutiérrez, T. A. Ezquerra, S. V. Roth, M. G. Zolotukhin y R. Serna.  
*Stacking of Main Chain-Crown Ether Polymers in Thin Films.*  
Langmuir **23**, 12677-12681 (2007).
- 177 A. Sanz, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari y T. A. Ezquerra.  
*Complex Nature of the Beta Relaxation and Fragility in Aromatic Polyesters.*  
Journal of Non Crystalline Solids **353**, 3989-3995 (2007).

- 178 M. Soccio, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari y T. A. Ezquerra.  
*Evidence of Early Stage Precursors of Polymer Crystals by Dielectric Spectroscopy.*  
Physical Review Letters **98**, 037801 (2007).
- 179 M. Soccio, L. Finelli, N. Lotti, A. Munari y T. A. Ezquerra.  
*Novel Heheroatoms Containing Polyesters Based on 2,6-Naphthalendicarboxylic Acid: A Comparative Study with Poly(Butylene Naphthalate).*  
Journal of Polymer Science Part B-Polymer Physics **45**, 1694-1703 (2007).
- 180 M. Soccio, A. Nogales, N. Lotti, A. Munari y T.A. Ezquerra.  
*The Beta-Relaxation as a Probe to Follow Real-Time Polymer Crystallization in Model Aliphatic Polyesters.*  
Polymer **48**, 4742-4750 (2007).
- 181 T. Uchiyama, M. Suyama, M. M. Alam, T. Asano, S. Henning, A. Flores, F. J. Baltá Calleja y M. F. Mina.  
*Layer Structure Formation in Oriented Poly(Ethylene Terephthalate) Relating to Micromechanical Properties.*  
Polymer **48**, 542-555 (2007).

### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM**

M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte y T. A. Ezquerra.  
*X-ray Microdiffraction and Micro-Raman Study on an Injection Moulding SWCNT-Polymer Nanocomposite.*  
Composite Science and Technology **67**, 798-805 (2007).  
**(Conjunta también con el Dpto. de EVPM).**

J. Otegui, J. F. Vega, S. Martín, V. Cruz, A. Flores, C. Domingo y J. Martínez-Salazar.  
*The Unit Cell Expansion of Branched Polyethylene as Detected by Raman Spectroscopy: An Experimental and Simulation Approach.*  
Journal of Materials Science **42**, 1046-1049 (2007).

## **6.2 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS NO ISI**

### **6.2.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

- 1 J. F. Barbero G., D. Gómez Vergel y E. J. S. Villaseñor.  
*Quantization of Linearly Polarized Cosmological Models with Two Killing Vector Fields.*  
Journal of Physics Conference Series **66**, 012035[7 págs.] (2007).
- 2 D. Brizuela, J. M. Martín-García y G. A. Mena Marugán.  
*High-Order Gauge-Invariant Perturbations of a Spherical Spacetime.*  
Journal of Physics Conference Series **66**, 012011[10 págs.] (2007).
- 3 P. Galán y G. A. Mena Marugán.  
*Thermodynamics of Black Holes in Gravity's Rainbow Formalisms.*  
Journal of Physics Conference Series **66**, 012036[4págs.] (2007).
- 4 C. Gundlach y J. M. Martín-García.  
*Critical Phenomena in Gravitational Collapse.*  
Living Reviews in Relativity **10**, 5 (2007).

### **6.2.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

- 5 M. Turrión, O. Tengblad, M. J. G. Borge, E. Reillo, E. R. Morrissey y M. Santana.  
*On Line Release Simulator of Radioactive Beams Produced by ISOL Technique.*  
AIP Conference Proceedings **884**, 278 (2007).

### 6.2.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR

- 6 C. Domingo y G. Santoro.  
*Espectroscopía Raman de nanotubos de carbono.*  
*Óptica Pura y Aplicada* **40**, 175-186 (2007).
- 7 E. Rebollar, M. M. Villavieja, S. Gaspard, M. Oujja, T. Corrales, S. Georgiou, C. Domingo, P. Bosch y M. Castillejo.  
*Pulsed Laser Deposition of Polymers Doped with Fluorescent Probes. Application to Environmental Sensors.*  
*Journal of Physics Conference Series* **59**, 305-309 (2007).

### PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM

- 8 J. V. García-Ramos, C. Domingo, L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette y S. Sánchez-Cortés.  
*Plasmonic Metal Nanoparticle Functionalization for Selective Sensing of Persistent Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering.*  
*Canadian Journal of Analytical Science Spectroscopy* **52**, 186-197(2007).
- 9 Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
*Vibrational Spectroscopy as an Analytical Tool in the Identification and Characterization of Natural Dyes Employed in the Cultural Heritage.*  
*Coalition Newsletter* **14**, 14-21 (2007).
- 10 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.*  
*Óptica Pura y Aplicada* **40**, 235-242 (2007).

### 6.2.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS

- 11 J. V. García-Ramos, S. Sánchez-Cortés, P. Leyton y M. Campos-Vallette.  
*Detección de PAHs mediante espectroscopía SERS sobre superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos.*  
*Óptica Pura y Aplicada* **40**, 227-233 (2007).
- 12 M. Jadraque, M. Martín, M. Santos, L. Díaz, M. Sawczak, A. Cenian y G. Sliwinski.  
*Plume Investigations of the Mechanisms of SiO Laser Ablation at 266 nm.*  
*Journal of Physics Conference Series* **59**, 293-296 (2007).

### PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM

- J. V. García-Ramos, C. Domingo, L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette y S. Sánchez-Cortés.  
*Plasmonic Metal Nanoparticle Functionalization for Selective Sensing of Persistent Pollutants by Surface-Enhanced Raman Scattering.*  
*Canadian Journal of Analytical Science Spectroscopy* **52**, 186-197(2007).
- Z. Jurasekova, C. Domingo, J. V. García-Ramos y S. Sánchez-Cortés.  
*Vibrational Spectroscopy as an Analytical Tool in the Identification and Characterization of Natural Dyes Employed in the Cultural Heritage.*  
*Coalition Newsletter* **14**, 14-21 (2007).
- 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.*  
*Óptica Pura y Aplicada* **40**, 235-242 (2007).

## **6.2.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

- 13 M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, J. J. Hernández, D. R. Rueda y T. A. Ezquerra.  
*X-Ray Scattering Applied to the Analysis of Carbon Nanotubes, Polymers and Nanocomposites.*  
*Óptica Pura y Aplicada* **40**, 195-205 (2007).

## **6.3 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE PROCEEDINGS**

### **6.3.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

- 1 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 CP899, Sixth International Conference of the Balkan Physical Union (eds. S-A. Cetin, I. Hikmet) 3-6, American Institute of Physics, E.E.U.U., 2007.  
ISBN: 978-0-7354-0404-5/07/.
- 2 R. Domínguez-Reyes, M. J. G. Borge, B. Blank, I. Matea, N. Adimi y J. C. Thomas.  
*Decay of the Neutron Deficient  $^{32}\text{Ar}$ , Revisited.*  
En "American Institute of Physics" 187-189 (PROCON07, Lisboa, 2007).  
ISBN: 978-0-7354-0475-5.
- 3 S. Jensen, D. V. Fedorov, H. O. U. Fynbo y E. Garrido.  
*Three-Body Decay of Nuclear Resonances.*  
En "Opportunities with Exotic Beams" 11-29 (World Scientific, Singapur, 2007).  
ISBN: 978-981-270-567-9.
- 4 M. Madurga, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado y K. Riisager.  
*Study of the Beta-Delayed Multiple Particle Break-Up of the 2.43 MeV State in Be-9.*  
En "International Symposium on Nuclear Astrophysics - Nuclei in the Cosmos – IX" 135 (Proceedings of Science, Italia, 2007).  
ISSN: 1824-8039
- 5 M. Madurga, M. J. G. Borge, H. O. U. Fynbo, B. Jonson, G. Nyman, Y. Prezado, K. Riisager y O. Tengblad.  
*Multiple Particle Emission after  $^{11}\text{Li}$  Beta-Decay: Exploring New Decay Channels.*  
En "Proton Emitting Nuclei and Other Related Topics" 224-227 (American Institute of Physics, E.E.U.U., 2007).  
ISBN: 978-0-7354-0475-5.
- 6 P. Sarriguren, O. Moreno, E. Moya de Guerra y R. Álvarez-Rodríguez.  
*Signatures of Deformation on Single and Double Beta Decay.*  
En "Proceedings of the 26th International Workshop on Nuclear Theory" 79-88 (Ed. S. Dimitrova, INRNE, Sofia, Bulgaria, 2007).  
ISBN: 1313-2822.

### **6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

- 7 C. Domingo.  
*Espectroscopía Raman de Nanotubos de Carbono.*  
En "Una década del Instituto de Física Aplicada: 1995-2005" 123-129 (Eds. P. Corredera, F. J. Gutiérrez, Madrid, 2007).  
ISBN: 978-84-612-1440-2.
- 8 M. Lefebvre, A. Mohamed, R. Z. Martínez, J. L. Domenech y D. Bermejo.  
*State-of-the-Art Technology Review (Technical Note 1).*  
Proyecto PULSNIR de la ESA, Technical Report RT 1/11819 DMPH. 64 páginas (febrero de 2007).  
Aprobado por el Departamento de Física e Instrumentación de la ESA.

- 9 M. Lefebvre, A. Mohamed, A. Godard, M. Raybaut, A. Berrou, R. Z. Martínez, J. L. Doménech, D. Bermejo, P. Kaspersen, A. Bohman, P. Geiser, F. Marnas, F. Gibert y P. Flamant.  
*Frequency Converter Unit Baseline Design Selection (Technical Note 2)*.  
Proyecto PULSNIR de la ESA, Technical Report RT 2/11819 DMPH. 88 páginas (mayo de 2007).  
Aprobado por el Departamento de Física e Instrumentación de la ESA.

### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE EVPM**

- 10 C. Domingo, L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y S. Sanchez-Cortés.  
*SERS- and SEIRA-Based Molecular Sensors. Selective Detection of PAH's Employing Different Silver Nanoparticle Functionalization Methods*".  
En "New Approaches in Biomedical Spectroscopy", ACS Symposium Series **963**, 138-151 (2007) (Eds. K. Kneipp, R. Aroca, H. Kneipp y E. Wentrup-Byrne).

### **6.3.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

- 11 T. Díaz-Santos, A. Alonso-Herrero, L. Colina, C. Packham, J. T. Radomski y C. M. Telesco.  
*Mid-Infrared T-ReCS Spectroscopy of Local LIRGs*.  
RMxAC **29**, 92 (2007).
- 12 M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Alonso-Herrero y A. Monreal-Ibero.  
*2D Study of a Representative Sample of Low-z (U)LIRGs Using Integral Field Spectroscopy*.  
At the Edge of the Universe: Latest Results from the Deepest Astronomical Surveys ASP Conference Series **380**, 511. Proceedings of the conference held 9-13 October, 2006 at Sintra, Portugal (Eds. J. Afonso, H. C. Ferguson, B. Mobasher y R. Norris, 2007).
- 13 M. García-Marín, L. Colina, S. Arribas, A. Monreal-Ibero, A. Alonso-Herrero y E. Mediavilla.  
*3D Spectroscopy of Low-z (Ultra)Luminous Infrared Galaxies, Science Perspectives for 3D Spectroscopy*.  
Eso Astrophysics Symposia European Southern Observatory, 213 (Springer-Verlag, Berlín, 2007).  
ISBN 978-3-540-73490-1.
- 14 M. García-Marín, N. P. F. Lorente, A. Glasse, L. Colina y G. Wright.  
*Simulations of High-z Starburst Galaxies for the JWST-MIRI Integral Field Unit. Science Perspectives for 3D Spectroscopy*.  
Eso Astrophysics Symposia European Southern Observatory, 33 (Springer-Verlag, Berlín, 2007).  
ISBN 978-3-540-73490-1.

### **6.3.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

- 15 J. A. Sánchez-Gil, J. V. García-Ramos, V. Giannini y E. R. Méndez.  
*Scattering of Electromagnetic Waves from Nanostructured, Self-Affine Fractal Surfaces: Near-Field Enhancements*.  
En "Light Scattering and Nanoscale Surface Roughness", Capítulo 11 (Ed. A. A. Maradudin, Springer, Nueva York, 2007).

### **PUBLICACIONES CONJUNTAS CON EL DPTO. DE FM**

C. Domingo, L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette, J. V. García-Ramos y S. Sanchez-Cortés.  
*SERS- and SEIRA-Based Molecular Sensors. Selective Detection of PAH's Employing Different Silver Nanoparticle Functionalization Methods*".  
En "New Approaches in Biomedical Spectroscopy", ACS Symposium Series **963**, 138-151 (2007) (Eds. K. Kneipp, R. Aroca, H. Kneipp y E. Wentrup-Byrne).

### **6.3.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR**

- 16 Aurora Nogales Ruiz  
*El plástico en el Siglo XXI*.  
En "Jornadas de Polímeros de Interés Tecnológico: Un Curso de Diapositivas en Power Point".

(Eds. M. A. Rodríguez-Pérez, M. L. Rodríguez-Méndez y V. Rives, Universidad de Valladolid, 2007).  
ISBN: 978-84-690-3739-3.

- 17 M<sup>a</sup> Cruz García Gutiérrez.  
*Química-Física de polímeros.*  
En “Jornadas de Polímeros de Interés Tecnológico: Un Curso de Diapositivas en Power Point”.  
(Eds. M. A. Rodríguez-Pérez, M. L. Rodríguez-Méndez y V. Rives, Universidad de Valladolid, 2007).  
ISBN: 978-84-690-3739-3.
- 18 Nogales, A. Sanz, I. Sics, M. C. García-Gutiérrez y T. A. Ezquerra.  
*Order and Segmental Mobility in Crystallizing Polymers.*  
En “Progress in Understanding of Polymer Crystallization”  
Lecture Notes in Physics **714**, 435-456 (Eds. G. Reiter y G. Strobl, 2007).  
ISBN-13 978-3-540-47305-3.

## **6.4 TESIS DOCTORALES**

### **6.4.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

Título de la Tesis: **Incertidumbre espaciotemporal y escalas invariantes en formalismos de Gravedad Cuántica.**

Universidad: Departamento de Física Teórica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha: 26 de septiembre 2007.

Calificación: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando: **Pablo Galán Sánchez.**

Director: **Guillermo Antonio Mena Marugán.**

### **6.4.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

Título: **Visualización y tratamiento de datos masivos con aplicación en Ciencias de la Materia.**

Universidad: Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco (UPV/EHU).

Fecha: 2 de abril de 2007.

Calificación: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando: **Ibon Bustinduy Uriarte.**

Director: **Francisco Javier Bermejo Barrera y Germán Bordel.**

Título: **Dinámica microscópica de líquidos no-simples.**

Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Cantabria.

Fecha: 26 de octubre de 2007.

Calificación: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando: **María Dolores Ruiz Martín.**

Director: **Francisco Javier Bermejo Barrera y Mónica Jiménez-Ruiz.**

### **6.4.3 DPTO. DE FÍSICA MOLECULAR**

Título: **Parámetros de ensanchamiento colisional de moléculas de interés atmosférico por espectroscopía de pérdida Raman estimulada.**

Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: junio de 2007.

Calificación: Sobresaliente “cum laude”.

Doctorando: **Laura Gómez Martín.**

Director: **Dionisio Bermejo y Jeanine Bonamy.**

### **6.4.4 DPTO. DE ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

Título: **Study of the Collisional Dynamics of N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> and H<sub>2</sub>O: Implications on the Characterization of Star Forming Regions.**

Universidad: Pierre & Marie Curie (Paris VI, France)/Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha: 23 de febrero de 2007.  
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.  
Doctorando: Fabien Daniel.  
Director: **Marie-Lise Dubernet-Tuckey y José Cernicharo Quintanilla.**

Título: **Estudio de la química en nubes oscuras.**  
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad de Granada.  
Fecha: 3 de diciembre de 2007.  
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.  
Doctorando: **Nuria Marcelino Lluch.**  
Director: **Rainer Mauersberger y José Cernicharo Quintanilla.**

Título: **Estudio de los precursores de choques generados por estrellas jóvenes.**  
Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.  
Fecha: 11 octubre de 2007.  
Calificación: Apto “cum laude”.  
Doctorando: **Izaskun Jiménez Serra.**  
Director: **Jesús Martín-Pintado Martín.**

Título de la Tesis: **Complejidad química en las nubes modelculares del centro galáctico.**  
Universidad: Departamento de Astrofísica y Ciencias de la Atmósfera, Facultad de Ciencias, Universidad Complutense de Madrid.  
Fecha: 16 de octubre 2007.  
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.  
Doctorando: **Miguel Ángel Requena Torres.**  
Director: **Jesús Martín-Pintado Martín.**

Título: **2D Structure and Kinematics of a Representative Sample of Low-z Ultraluminous Infrared Galaxies.**  
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.  
Fecha: 20 de diciembre de 2007.  
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.  
Doctorando: **Macarena García Marín.**  
Director: **Luis Colina Robledo y Santiago Arribas Mocoroa.**

#### **6.4.5 DPTO. DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y PROCESOS MULTIFOTÓNICOS**

Título: **Interacción de luz con nanoestructuras metálicas: procesos de intensificación local por plasmones superficiales resonantes.**  
Universidad: Dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.  
Fecha: 15 de octubre de 2007.  
Calificación: Sobresaliente “cum laude”.  
Doctorando: **Vincenzo Giannini.**  
Director: **Jose A. Sánchez Gil.**

### **6.5 TESIS DE LICENCIATURA, DIPLOMAS DE ESTUDIOS AVANZADOS Y TRABAJOS DE MÁSTER**

#### **6.5.1 DPTO. DE QUÍMICA Y FÍSICA TEÓRICAS**

Título del Trabajo de Máster: **Cuantización del modelo de Gowdy T3 con polarización lineal.**  
Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.  
Fecha: 27 de septiembre de 2007.  
Calificación: Sobresaliente.  
Diplomado: **Mercedes Martín Benito.**  
Directores: **Guillermo Antonio Mena Marugán y Luis J. Garay Elizondo.**

Título del Trabajo de DEA: **Modelo cosmológico T3 de Gowdy acoplado con materia. Teoría clásica y cuantización exacta.**

Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 26 de junio de 2007.

Calificación: Sobresaliente.

Diplomado: **Daniel Gómez Vergel.**

Directores: **J. Fernando Barbero G. y Eduardo J. S. Villaseñor.**

Título del Trabajo de DEA: **Stability and Quasinormal Modes of Acoustic Black Holes in Bose–Einstein Condensates.**

Universidad: Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 26 de junio de 2007.

Calificación: Sobresaliente.

Diplomado: **Gil Jannes.**

Director: **Luis Garay Elizondo.**

## **6.5.2 DPTO. DE FÍSICA NUCLEAR Y FÍSICA ESTADÍSTICA**

Título del DEA: **Generalización de Modelos de Richardson-Gaudin a álgebras de rango dos y su aplicación en física nuclear.**

Universidad: Departamento de Física Teórica, Universidad Autónoma de Madrid.

Fecha: 2007.

Calificación: Apto.

Diplomado: **Beatriz Errea Subero.**

Director: **Jorge Dukelsky Bercovich.**

Título del DEA: **Estudio de la desintegración beta del  $^{33}\text{Ay}$  y  $^{32}\text{Ar}$ .**

Universidad: Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 20 de diciembre 2007.

Calificación: Sobresaliente.

Diplomado: **Ricardo Domínguez Reyes.**

Director: **María José García Borge**

Título del DEA: **Estudio del  $^5\text{H}$  como sistema de tres cuerpos: cálculo de resonancias y distribuciones de energía.**

Universidad: Departamento de Física Teórica II, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 4 de octubre de 2007.

Calificación: Apto.

Diplomado: **Raúl de Diego Martínez.**

Director: **Eduardo Garrido Bellido.**

Título del DEA: **Researches on Mathematical Physics and Computational Algorithms.**

Universidad: Max-Planck Institute für QuantenOptik (Doctorado asociado a la Technischen Universität München).

Fecha: 6 de julio 2006.

Calificación: Sobresaliente.

Diplomado: **Mikel Sanz Ruiz.**

Directores: **Dr. Juan Ignacio Cirac Sasturain, Dr. Michael Wolf y Dr. Carlos Cabrillo.**

## **6.5.4 DPTO. ASTROFÍSICA MOLECULAR E INFRARROJA**

Título del DEA: **Distribución del monóxido de silicio en los parsecs centrales de la Galaxia.**

Universidad: Departamento de Astrofísica y Ciencias de la Atmósfera, Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 4 de octubre de 2007.

Calificación: Sobresaliente.

Diplomado: **M<sup>o</sup> Aranzazu Amo Baladrón.**

Director: **Jesús Martín-Pintado Martín.**

Título del DEA: **Estudio a altas energías de binarias de alta masa del plano galáctico con INTEGRAL.**

Universidad: Departamento de Astronomía y Astrofísica, Universidad de Valencia.

Fecha: 24 de diciembre de 2007.  
Calificación: Sobresaliente.  
Diplomado: **Daniel Miralles Caballero.**  
Director: **Víctor Reglero Velasco.**

**CAPÍTULO 7**  
**TABLAS Y DATOS**



## 7.1 DATOS COMPARATIVOS CON LAS PREVISIONES DEL PLAN ESTRATÉGICO

	Previsión 2005	2005	Previsión 2006	2006	Previsión 2007	2007
Número de artículos en revistas SCI	135	140	140	178	147	181
Número de artículos en revistas NO SCI y capítulos de libros	13	18	13	20	12	31
Stock total de becas/contratos pre-doctorales	23	32	24	39	25	40
Stock total de becas/contratos post-doctorales	13	15	14	18	15	15
Tesis doctorales leídas	4	4	5	8	5	10
Créditos de cursos de doctorado/postgrado	20	20	22	27,5	25	49,2

## 7.2 RESUMEN DE PUBLICACIONES EN REVISTAS ISI

REVISTA	NÚMERO DE PUBLICACIONES	ÍNDICE DE IMPACTO (JCR -2006)
Nano Letters	1	9.960
Physical Review Letters	8	7.072
Astrophysical Journal	19	6.119
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	1	5.057
Physics Letters B	3	5.043
Physical Review D	5	4.896
Macromolecules	3	4.277
Optics Express	1	4.009
Astronomy & Astrophysics	15	3.971
Inorganic Chemistry	1	3.911
Langmuir	2	3.902
Carbon	1	3.884
Journal of Organic Chemistry	1	3.790
Proteins-Structure Function and Bioinformatics	1	3.730
Organometallics	1	3.632
Optics Letters	1	3.598
CHEMPHYSICHEM	1	3.449
Physical Review C	8	3.327
Biochimica et Biophysica Acta-Proteins and Proteomics	1	3.311
Journal of Chemical Physics	7	3.166
Physical Review B	12	3.107
Journal of Physical Chemistry A	1	3.047
Physical Chemistry Chemical Physics	1	2.892
Classical and Quantum Gravity	1	2.773
Polymer	6	2.773
Atmospheric Environment	1	2.630
Biopolymers	1	2.480
Chemical Physics Letters	3	2.462
Physical Review E	1	2.438
Food Chemistry	2	2.433

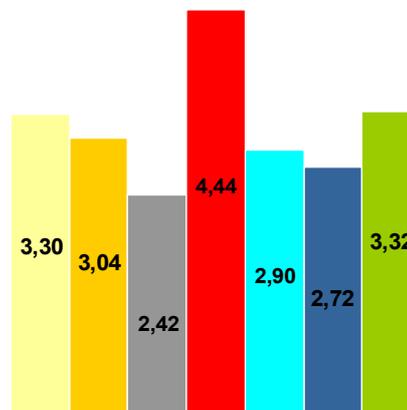
Journal of the Electrochemical Society	1	2.387
Journal of Organometallic Chemistry	1	2.332
Journal of Applied Physics	2	2.316
Solid State Ionics	1	2.190
Journal of the Atmospheric Sciences	1	2.163
Nuclear Physics A	7	2.155
Journal of Raman Spectroscopy	2	2.133
Journal of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry	1	2.098
Journal of Physics D-Applied Physics	1	2.077
Journal of Physics-Condensed Matter	1	2.038
Composites Science and Technology	2	2.027
Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics	1	2.024
Journal of the Optical Society of America A-Optics Image Science and Vision	1	2.002
New Astronomy Reviews	1	1.914
Vibrational Spectroscopy	2	1.880
Applied Spectroscopy	1	1.879
Physics of Fluids	1	1.697
Molecular Physics	1	1.690
Chemical Vapor Deposition	1	1.679
International Journal of Modern Physics D	1	1.651
Journal of Polymer Science Part B.Polymer Physics	2	1.622
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer	1	1.599
Computer Physics Communications	1	1.595
Journal of Physics A-Mathematical and General	1	1.577
Astronomical Journal	1	1.548
Review of Scientific Instruments	1	1.541
Journal of Molecular Structure	1	1.495
European Physical Journal A	4	1.459
Applied Surface Science	1	1.436
Journal of Non-Crystalline Solids	7	1.362
Journal of Applied Polymer Science	3	1.306
Journal of Materials Science	1	0.999
Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Part B - Beam Interactions with Materials and Atoms	2	0.946
Acta Physica Polonica B	1	0.882
International Journal of Modern Physics E-Nuclear Physics	1	0.810
Physica C-Superconductivity and Its Applications	1	0.792
Composite Interfaces	1	0.788
Low Temperature Physics	1	0.622
Baltic Astronomy	2	0.130
Arbor- Ciencia, Pensamiento y Cultura	1	-
European Physical Journal-Special Topics	4	-
Journal of Physical Chemistry C	1	-
Journal of the Korean Astronomical Society	1	-
Plasmonics	1	-
<b>TOTAL:</b>	<b>181</b>	<b>Índice de impacto medio: 3,319</b>

**Número de revistas: 74**

### 7.3 ÍNDICE DE IMPACTO MEDIO DE LAS PUBLICACIONES ISI 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	3,30
FNFE	3,04
FM	2,42
DAMIR	4,44
EVPM	2,90
FMM	2,72
IEM	3,32

### 7.4 PERSONAL DE LOS DPTOS.

DPTO.	Científicos en Plantilla		“Ramón y Cajal”		Otros PostDocs		Drs. Vinculados		Resto de Personal Científico <sup>1</sup>		Personal de Apoyo		Personal Total		
	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	H	M	TOTAL
<b>QFT</b>	3	-	-	-	2	-	2	-	4	1	-	-	11	1	<b>12</b>
<b>FNFE</b>	7	1	-	-	4	1	2	1	10	3	1	1	24	7	<b>31</b>
<b>FM</b>	9	3	-	-	3	-	-	-	1	5	3	2	16	10	<b>26</b>
<b>DAMIR</b>	6	2	-	1	-	-	1	1	12	8	1	1	20	13	<b>33</b>
<b>EVPM</b>	5	1	-	-	1	2	1	1	3	1	-	3	10	8	<b>18</b>
<b>FMM</b>	5	5	1	1	2	-	1	-	2	2	1	1	12	9	<b>21</b>
<b>Admon.</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	5	-	5	<b>5</b>
<b>IEM</b>	35	12	1	2	12	3	7	3	32	20	6	13	93	53	<b>146</b>

<sup>1</sup> Sin incluir “Autorizaciones de permanencia”

(Véase la “Clave de Dptos.” en el apartado 7.3)

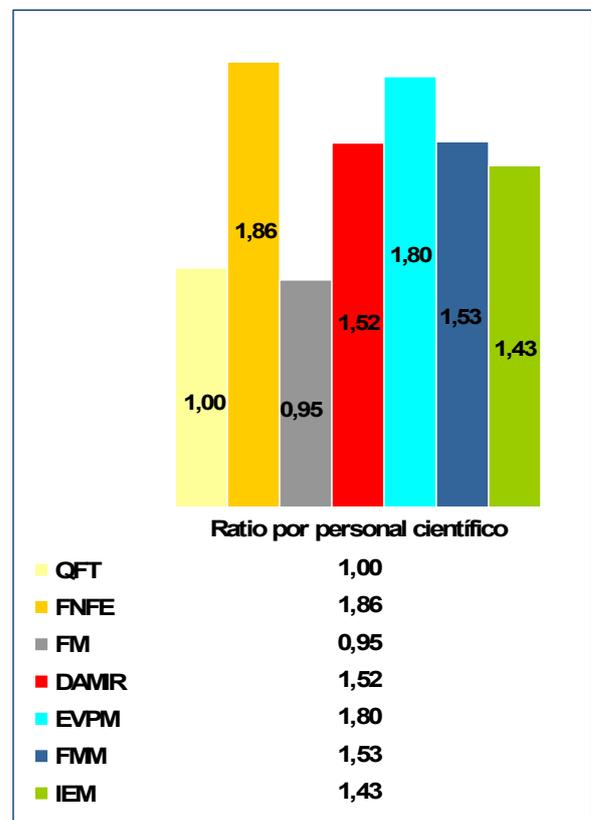
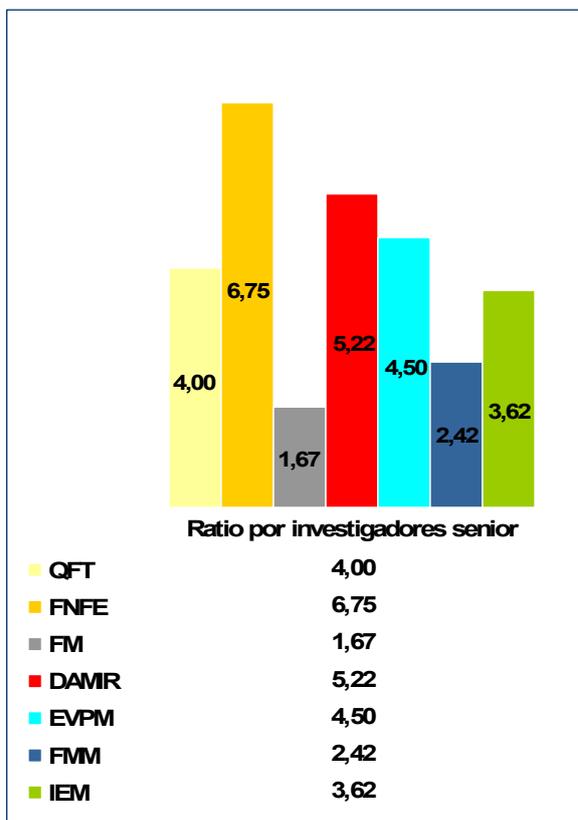
**Personal del IEM sin incluir Drs. Vinculados: 136**

## 7.5 NÚMERO DE PUBLICACIONES POR DPTOS.

	QFT	FNFE	FM	DAMIR	EVPM	FMM
Publicaciones en revistas ISI	12	54	20	47	27	29
Otras publicaciones y monografías	4	7	9	4	7	4

## 7.6 RATIO DE PUBLICACIONES ISI POR DPTOS.

- **Ratio por investigadores “senior”** (en plantilla más Drs. “Ramón y Cajal”).
- **Ratio por personal científico** (personal total excepto el de apoyo).



(Véase la “Clave de Dptos.” en el apartado 7.3)

**Ratio de publicaciones ISI del IEM por personal científico en plantilla: 3,85**

# ÍNDICE



<b>Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>1. Estructura del Instituto .....</b>	<b>3</b>
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
<b>2. Labor investigadora.....</b>	<b>11</b>
2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	13
2.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	17
2.3 Dpto. de Física Molecular.....	24
2.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	28
2.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	36
2.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	42
<b>3. Proyectos de investigación.....</b>	<b>51</b>
3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas.....	53
3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística.....	53
3.3 Dpto. de Física Molecular.....	56
3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja.....	58
3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	61
3.6 Dpto. de Física Macromolecular.....	63
<b>4. Cooperación científica .....</b>	<b>67</b>
4.1 Congresos y reuniones nacionales .....	69
4.1.1 Dpto. de Química y Física Teóricas .....	69
4.1.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	69
4.1.3 Dpto. de Física Molecular .....	69
4.1.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	69
4.1.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	70
4.1.6 Dpto. de Física Macromolecular .....	70
4.2 Congresos y reuniones internacionales .....	71
4.2.1 Dpto. de Química y Física Teóricas .....	71
4.2.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	72
4.2.3 Dpto. de Física Molecular .....	75
4.2.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	77
4.2.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	79
4.2.6 Dpto. de Física Macromolecular .....	81
4.3 Estancias de investigadores en el Instituto .....	83
4.3.1 Dpto. de Química y Física Teóricas .....	83
4.3.2 Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	83
4.3.3 Dpto. de Física Molecular .....	84
4.3.4 Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	84
4.3.5 Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	84
4.3.6 Dpto. de Física Macromolecular .....	85
4.4 Conferencias de investigadores invitados .....	85

4.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	85
4.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	87
4.4.3	Dpto. de Física Molecular .....	87
4.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	88
4.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	88
4.4.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	88
4.5	Visitas de investigadores a centros internacionales (de una semana o más) .....	89
4.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	89
4.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	89
4.5.3	Dpto. de Física Molecular .....	90
4.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	90
4.5.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	91
4.5.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	92
<b>5.</b>	<b>Labor docente, difusión de la ciencia y otras actividades .....</b>	<b>93</b>
5.1	Asignaturas de doctorado impartidas por investigadores del Instituto.....	95
5.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	95
5.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	95
5.1.3	Dpto. de Física Molecular .....	95
5.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	96
5.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	96
5.2	Cursos y conferencias impartidos por investigadores del Instituto .....	96
5.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	96
5.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	97
5.2.3	Dpto. de Física Molecular .....	97
5.2.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	98
5.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	98
5.2.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	99
5.3	Cursos, congresos y seminarios organizados por el Instituto .....	100
5.3.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	100
5.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	100
5.3.3	Dpto. de Física Molecular .....	101
5.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	101
5.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	102
5.3.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	103
5.4	Premios y otros méritos .....	103
5.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	103
5.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	103
5.4.3	Dpto. de Física Molecular .....	104
5.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	104
5.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	104
5.4.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	105
5.5	Transferencia de tecnología .....	105
5.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	105
5.5.3	Dpto. de Física Molecular .....	105
5.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	106
5.5.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	106
5.6	Unidades Asociadas .....	107
5.6.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	107
5.6.3	Dpto. de Física Molecular .....	107
5.6.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos.....	107
<b>6.</b>	<b>Publicaciones y producción científica .....</b>	<b>109</b>
6.1	Trabajos publicados en revistas ISI .....	111
6.1.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	111
6.1.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	111

6.1.3	Dpto. de Física Molecular .....	116
6.1.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	117
6.1.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	121
6.1.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	123
6.2	Trabajos publicados en revistas no ISI .....	125
6.2.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	125
6.2.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	125
6.2.3	Dpto. de Física Molecular .....	126
6.2.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	126
6.2.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	127
6.3	Libros, monografías y publicaciones de <i>proceedings</i> .....	127
6.3.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	127
6.3.3	Dpto. de Física Molecular .....	127
6.3.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	128
6.3.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	128
6.3.6	Dpto. de Física Macromolecular .....	128
6.4	Tesis doctorales .....	129
6.4.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	129
6.4.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	129
6.4.3	Dpto. de Física Molecular .....	129
6.4.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	129
6.4.5	Dpto. de Espectroscopía Vibracional y Procesos Multifotónicos .....	130
6.5	Tesinas de Licenciatura, Diploma de Estudios Avanzados y Trabajos de Máster .....	130
6.5.1	Dpto. de Química y Física Teóricas .....	130
6.5.2	Dpto. de Física Nuclear y Física Estadística .....	131
6.5.4	Dpto. de Astrofísica Molecular e Infrarroja .....	131
7.	Tablas y datos .....	133
7.1	Datos comparativos con las previsiones del Plan Estratégico .....	135
7.2	Resumen de publicaciones en revistas ISI .....	135
7.3	Índice de impacto medio de las publicaciones ISI por Dptos. ....	137
7.4	Personal de los Dptos. ....	137
7.5	Número de publicaciones por Dptos. ....	138
7.6	Ratio de publicaciones ISI por Dptos. ....	138