

**MEMORIA DEL DEPARTAMENTO
DE FÍSICA MACROMOLECULAR
DEL INSTITUTO DE ESTRUCTURA
DE LA MATERIA (CSIC)**

AÑO 2010

CAPÍTULO 1
ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

CHAPTER 1
STRUCTURE OF THE INSTITUTE

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR / MACROMOLECULAR PHYSICS

Jefe del Departamento / Head of Department:

Dra. Aurora Nogales Ruíz

Investigadora Científica / Research Scientist

Personal Científico / Research Staff:

Prof. Tiberio A. Ezquerro Sanz

Profesor de Investigación / Research Professor

Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana

Profesor de Investigación / Research Professor

Dr. Daniel R. Rueda Bravo

Investigador Científico / Research Scientist

Dr. Fernando Ania García

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Maria Esperanza Cagiao Escohotado

Científica Titular / Tenured Scientist

Dra. María José Capitán Aranda

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Victor Cruz Cañas

Científico Titular / Tenured Scientist

Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat

Científica Titular / Tenured Scientist

Dra. M^a Cruz García Gutiérrez

Científica Titular / Tenured Scientist

Dra. Amelia Linares Dos Santos

Científica Titular / Tenured Scientist

Dr. Juan Francisco Vega Borrego

Científico Titular / Tenured Scientist

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz

Investigador Contratado -I3P / Postdoc Contract-I3P

Dr. Alejandro Sanz Parras

Investigador Contratado JAE Postdoctoral / Postdoc JAE

Prof. Francisco José Baltá Calleja

Profesor vinculado "ad honorem" / Emeritus Professor

Dra. Carmen Arribas Arribas

Doctora Vinculada / Doctor in Vinculum

D. Juan Felipe Franco González

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

D. Jaime Javier Hernández Rueda

Becario Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI (till 30/09)

D. Ignacio Martín-Fabiani Carrato

Becario Predoctoral / PhD Fellowship

D. Daniel Martínez Tong

Becario Predoctoral JAE / PhD Fellowship-JAE

Dña. Nuria Robledo Álvaro

Becaria Predoctoral -I3P / PhD Fellowship-I3P

Dña. Sara Sanmartín Sánchez

Becaria Predoctoral-FPI / PhD Fellowship-FPI

Dña. Marianella Hernández Santana

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Dña. Fátima Montero Sánchez

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

Dña. Almudena Ochoa Mendoza

Autorizada Permanencia / Authorized Stay

D. Ernesto Vicente Alique

Becario JAE-Intro (1st of August-30th of September 2010)

Personal de apoyo / Support Staff:

Dr. José Carlos Canalda Cámara

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate

D. Rafael Núñez Ramírez

Titulado Superior Especializado / Specialized University Graduate

Dña. Ana M. Montero Cuellar

Ayudante de Investigación / Research Assistant

CAPÍTULO 2A
LABOR INVESTIGADORA

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:

- Nanoestructura de películas delgadas poliméricas.
- 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.
- 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.
- Microscopía electrónica de transmisión: Estudio estructural tridimensional de macromoléculas biológicas.
- Biofísica.

TÉCNICAS UTILIZADAS:

- Dispersión y difracción de rayos X a ángulos grandes (WAXS), pequeños (SAXS), ultra-pequeños (USAXS) y con incidencia rasante (GISAXS), incluyendo el uso de micro- y nano-haces de radiación sincrotrón.
- Calorimetría diferencial de barrido.
- Dispersión cuasielástica de neutrones (IQNS).
- Microscopía óptica y de barrido (SEM).
- Espectroscopía Raman.
- Micro- y nano-dureza.
- Dispersión de neutrones.
- Espectroscopía dieléctrica de banda ancha.
- Reometría de cizalla en torsión dinámica y continua.
- Reometría de extrusión capilar y elongacional.
- Análisis dinamo-mecánico en flexión.
- Análisis mecánico en tracción: módulo elástico.
- Análisis mediante fraccionamiento por temperatura de cristalización.
- Microscopía electrónica de barrido y transmisión (STEM) y de fuerzas atómicas (AFM).
- Cromatografía de permeabilidad en gel (GPC) y dispersor de luz multiángulo (MALLS) a alta temperatura.
- Dispersión dinámica de luz laser (DLS).

LABOR INVESTIGADORA:

ESTUDIO DE LA NANOESTRUCTURA Y LA ESTABILIDAD TÉRMICA EN PELÍCULAS MULTILAMINARES POLIMÉRICAS AMORFAS

Se ha analizado, por primera vez, mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra-pequeños (USAXS) la estructura nanolaminar de dos polímeros inmiscibles amorfos, forzados a adoptar dicho ensamblaje mediante la técnica de coextrusión multiplicadora. Se ha observado que los largos espaciados de la serie de películas estudiadas de polimetacrilato de metilo y poliestireno (PMMA/PS) muestran una muy buena correlación con los valores de las periodicidades nominales de los apilamientos de láminas alternantes de PMMA y de PS. Además, los largos espaciados derivados de áreas localizadas mediante AFM también concuerdan satisfactoriamente con los resultados de USAXS, que son valores promediados de regiones mucho más grandes. Se ha investigado la variación estructural, después de un

tratamiento térmico, de dos muestras cuyas periodicidades nominales se aproximan a los 200 nm. Después de calentar las películas en el rango de temperaturas entre temperatura ambiente y 140°C, se ha comprobado mediante AFM que la estructura nanolaminar se mantiene mayoritariamente intacta. Sin embargo, la ausencia anómala de máximos de USAXS en un pequeño intervalo de temperaturas incluido en el anterior, se ha explicado de forma tentativa por medio de un modelo en el que las superficies interlaminares se vuelven irregulares y presentan efectos de desmojado espinodal (“spindal dewetting”). Para tratamientos por encima de 140°C, la ruptura gradual de láminas a partir de procesos interfaciales concluye con la desaparición de la estructura multilaminar.

EFFECTOS DE DIMENSIONALIDAD FINITA EN SISTEMAS POLIMÉRICOS MULTILAMINARES: DESARROLLO DE LAMINILLAS CRISTALINAS BAJO CONFINAMIENTO FÍSICO

Se ha investigado, mediante medidas calorimétricas, la variación de la temperatura de transición vítrea y el proceso de cristalización en láminas ultrafinas (unas pocas decenas de nm) de politereftalato de etileno (PET) en función del espesor de las láminas. Estas láminas se hallan constreñidas entre láminas de policarbonato (PC), formando el conjunto un sistema multilaminar de PET/PC. Los resultados se han discutido en términos de espesor reducido y efectos interfaciales. Se ha explorado la aparición y la evolución de orientación de laminillas cristalinas de PET durante la cristalización isoterma a partir del estado vítreo utilizando la técnica de dispersión de rayos X a ángulos pequeños (SAXS) en tiempo real. El análisis de los datos de SAXS ha puesto de manifiesto que los efectos de dimensionalidad finita dificultan el proceso de cristalización. Sin embargo, la estructura final de laminillas cristalinas es similar, tanto para el caso de PET nanolaminar, como para el mismo material en volumen. Los resultados sugieren que la inserción de laminillas es un mecanismo presente durante la cristalización, así como un cierto engrosamiento de las mismas. Se ha llegado también a la conclusión de que aparecen dos poblaciones de laminillas cristalinas diferentes: una, con sus superficies basales perpendiculares al apilamiento de las láminas, se encuentra próxima a las intercaras; otra población de cristales, con las superficies basales paralelas a las láminas, está situadas en el interior y su desarrollo parece estar determinado por las condiciones de confinamiento.

INVESTIGACIÓN DE LA MICRODUREZA DE MATERIALES TERMOPLÁSTICOS NANOESTRUCTURADOS

Se ha investigado el comportamiento micromecánico de varios materiales nanocompuestos de matriz termoplástica con la ayuda de la técnica de microdureza. Los materiales estudiados han sido un sistema de copolímeros en bloque de estireno-butadieno separados en microfases y varios compuestos termoplásticos reforzados con cargas de tamaño nanométrico de dimensionalidad variable. Se ha encontrado que la microdureza de los nanocompuestos está fuertemente condicionada por las dimensionalidades de la carga. Las cargas uni- y bidimensionales presentan una mucho mejor capacidad de refuerzo que las tridimensionales, debido a su gran relación superficie/volumen. En el caso de copolímeros en bloque nanoestructurados, la microdureza no sólo está determinada por la composición total de poliestireno/polibutadieno sino que disminuye gradualmente con la presencia de cadenas de polibutadieno libremente suspendidas, incluso cuando la morfología de los sistemas permanece invariable.

ESTUDIO DE LA MORFOLOGÍA Y LA NANOESTRUCTURA DE NANOFIBRAS DE NYLON/GRAFENO

Se han investigado la morfología y la nanoestructura de una serie de membranas producidas por la técnica de electrohilado, constituidas por nanofibras de nylon/grafeno en las cuales se varía la proporción de grafeno. Se ha podido determinar que el proceso de electrohilado altera la nanoestructura de la poliamida. Estudios de difracción de rayos X han puesto de manifiesto que la fracción de material cristalino, el tamaño lateral de cristal y el espesor de los cristales de poliamida es menor en las nanofibras de nylon 66 que el característico de una película del mismo material preparada mediante moldeo en el fundido. El grado de incorporación del grafeno a la nanofibras se pudo investigar asimismo mediante estudios de microscopía electrónica. Finalmente, se ha podido determinar que la estructura cristalina del nylon se ve afectada por la presencia del grafeno, observándose un progresivo aumento de la distancia entre átomos que interaccionan mediante puentes de hidrógeno con el contenido de grafeno.

ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MICROMECAÑICAS DE MEZCLAS DE POLI(ETILEN TEREFTALATO) RECICLADO CON POLIOLEFINAS. EFECTO DEL COMPATIBILIZADOR SEBS-MAH

Se han investigado mezclas binarias de poli(etileno tereftalato) (PET) reciclado con polipropileno isotáctico (iPP), y con polietileno de alta densidad (HDPE), preparados en la Universidad de Sétif (Argelia). Se trata, en ambos casos, de mezclas incompatibles. Sin embargo, la adición a estas mezclas de SEBS-MAH (copolímero en bloque estireno-etileno/butileno-estireno injertado con anhídrido maleico) en diferentes proporciones da lugar a su compatibilización, como demuestra el estudio llevado a cabo mediante difracción de rayos X a ángulos altos (WAXS), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y medida de la microdureza. También se han estudiado el efecto de la adición de arcilla en diferentes proporciones a las mezclas anteriores. En el caso de las mezclas PET/iPP, la presencia de arcilla parece tener un efecto nucleante sobre el iPP, aumentando la cristalinidad y la microdureza de las mezclas compatibilizadas. Por el

contrario, la cristalinidad de todas las mezclas PET/HDPE (puras, con compatibilizador, o con compatibilizador y arcilla) depende solamente de su composición.

RELACIÓN PROPIEDADES MICROMECAÑICAS-NANOESTRUCTURA EN POLIÉSTERES ALIFÁTICOS BIODEGRADABLES

Se ha estudiado un conjunto de poliésteres alifáticos biodegradables, sintetizados por el equipo del Prof. Kricheldorf, de la Universidad de Hamburgo (Alemania). Las técnicas utilizadas: difracción de rayos X a ángulos de Bragg grandes (WAXS) y pequeños (SAXS), DSC, y medida de la microdureza, nos han permitido determinar los grados de cristalinidad y tamaños de cristal de las diferentes muestras, así como su correlación con la microdureza. Las diferencias entre las propiedades térmicas y mecánicas de estos poliésteres y las exhibidas por los poliésteres aromáticos se explican por la diferente naturaleza química de las unidades monoméricas.

ESTUDIO DE “COMPOSITES” DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO CON ARCILLA, Y CON BIÓXIDO DE TITANIO

Se trata de materiales compuestos de iPP con arcilla, o con bióxido de titanio, TiO_2 , preparados por un equipo de la Universidad de Dhaka (Bangladesh). El estudio se ha llevado a cabo mediante WAXS, SAXS, DSC y medida de la microdureza. Los resultados obtenidos indican que la microestructura y la microdureza, tanto del iPP puro como de los “composites”, dependen de la temperatura de procesamiento del material, y de su velocidad de enfriamiento desde el fundido. En el material lentamente enfriado, la presencia de cantidades crecientes de aditivo provoca una disminución de la cristalinidad del iPP y de la microdureza del material. Este efecto es notablemente mayor en las muestras con arcilla que en las que contienen TiO_2 . Por otro lado, en las muestras enfriadas rápidamente preparadas con arcilla la cristalinidad aumenta con el contenido de la misma, mientras que en las basadas en TiO_2 el comportamiento es el contrario. La dureza de todas las muestras enfriadas rápidamente aumenta con el contenido en aditivo, con independencia de su naturaleza.

ALGUNOS ASPECTOS INTERESANTES DEL ENTRECRUZAMIENTO REVERSIBLE DE POLIPROPILENO ISOTÁCTICO

Hemos continuado la línea de investigación sobre el polipropileno isotáctico entrecruzado de modo reversible según el método desarrollado por el Dr. Saïd Bouhelal, de la Universidad de Sétif (Argelia). En colaboración con otros grupos de investigación, hemos llevado a cabo cuatro estudios en paralelo sobre el polipropileno isotáctico entrecruzado, que llamaremos XiPP: 1) Influencia del contenido en agentes entrecruzantes y 2) influencia de un proceso de entrecruzamiento repetido sobre la microestructura del XiPP; 3) posible uso de estas composiciones como “master batches” para mejorar las propiedades del iPP, incluso degradado; 4) efecto del número de ciclos de extrusión sobre las características del XiPP para comprobar su capacidad de auto-reparación. Las muestras se han caracterizado mediante las siguientes técnicas: WAXS, DSC, análisis térmico mecánico dinámico DMTA, resonancia magnética nuclear ^{13}C NMR, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier FTIR, y medida del “Melt Flow Index” MFI. Los resultados obtenidos demuestran que la microestructura del iPP no experimenta cambios de importancia ni por la adición de agentes de entrecruzamiento en diferentes proporciones, ni después de someter el material a varios procesos de entrecruzamiento sucesivos, lo que implica un elevado número de ciclos de extrusión. Además, se evidencia la posibilidad de utilizar el XiPP como “master batch” que puede ser añadido a un iPP sin modificar en diferentes proporciones.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 3D

Mediante nanopartículas. Se han usado nanotubos de carbono como plantillas para controlar la nanoestructura intrínseca de los polímeros semicristalinos con el fin de optimizar las propiedades físicas de los sistemas nanocompuestos. En concreto, se prepararon mediante polimerización in-situ, nanocompuestos de Poly(ethylene terephthalate) (PET), y nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT) como aditivo. Se ha encontrado que las ondulaciones de la estructura de los nanotubos tienen influencia en las propiedades mecánicas y que cierto grado de agregación de los SWCNT mejora las propiedades ópticas e incrementa la conductividad eléctrica. Asimismo, siguiendo esta línea se ha investigado la dinámica segmental de la goma natural y vulcanizada en una serie de nanocompuestos con nanoarcillas. Los resultados revelan que ni la concentración ni el tipo de arcilla modifica la dinámica segmental, relacionada con la viscosidad, del sistema. Por el contrario la dinámica de la cadena, relacionada con la fluidez, se ve ralentizada por la presencia de las nanoarcillas. Hemos atribuido este efecto a una localización de cadenas de goma natural en la intercara goma/arcilla. Siguiendo esta línea, en colaboración con el grupo de polímeros y micro-fluidos del departamento de ingeniería química del Imperial College London (Londres, Reino Unido), hemos estudiado la dinámica a distintas escalas espaciales y temporales de una familia de nano-compuestos formada por poli(estireno) y nanopartículas de C60. Las herramientas experimentales utilizadas fueron principalmente la dispersión de neutrones, la calorimetría diferencial de barrido y la espectroscopia dieléctrica. Las nano-partículas de C60 inducen un incremento de

la temperatura de transición vítrea de la matriz de poli(estireno), o lo que es lo mismo, una ralentización de la dinámica segmental de las cadenas de poli(estireno), mientras que en el estado vítreo se ha observado un reblandecimiento del material a altas frecuencias a través de medidas del factor de Debye-Waller. Estos efectos se han interpretado en base a un mayor impedimento en el empaquetamiento de las cadenas debido a la presencia de las nano-partículas, causando además un aumento de la fragilidad dinámica en la formación del vidrio. Nuestros resultados, en combinación con información previa, demuestran que la fragilidad del sistema formador de vidrio puede modelarse en función de la elección de la nano-partícula lo cual posee importantes implicaciones en las propiedades mecánicas, permeabilidad y otras propiedades físicas del nano-compuesto. También se han estudiado, mediante dispersión de rayos X a ángulos ultra bajos (USAXS), la influencia que el tipo de partícula, tiene sobre la reología de una matriz polimérica. En este caso las nanopartículas han sido óxidos de hierro y las matrices redes poliméricas interpenetrantes de poly(N-isopropylacrylamide) (PNiPAAm). La combinación de USAXS y reología han permitido determinar cuando las partículas de óxido de hierro se enlazan con la matriz polimérica y cuando están simplemente encajadas en la misma.

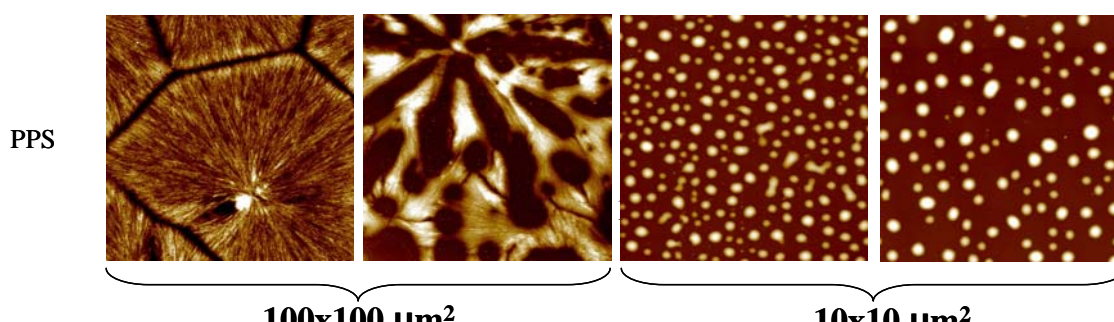
Polímeros semicristalinos. Dentro de la investigación encaminada a dilucidar la interrelación volúmica (3D) entre la nanoestructura intrínseca de un polímero semicristalino y la dinámica segmental se ha investigado, mediante medidas simultáneas de dispersión de rayos X y espectroscopía dieléctrica, la cristalización del Poly(trimethylene terephthalate)(PTT). La simultaneidad de ambas medidas ha permitido dilucidar el efecto que la formación de cristales ejerce sobre la dinámica molecular de la fase amorfa remanente. Esta dinámica es la responsable de las propiedades mecánicas a temperatura ambiente de la mayoría de los polímeros semicristalinos. El PTT es un poliéster aromático que presenta mejores propiedades físicas y de procesado en comparación con PET comúnmente usado en la industria en la actualidad. Nuestros experimentos demuestran que la homogeneidad estructural, reflejada en la distribución de fase cristalina embebida en la fase amorfa, es mejor que en el caso de su homólogo PET.

Autoensamblado en copolímeros dibloque. Los diagramas de fases de copolímeros en bloque formados por dos componentes se han estudiado mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) y calorimetría diferencial de barrido (DSC). Mediante las medidas de SAXS se han determinado las temperaturas de transición orden-desorden y las morfologías adoptadas por dichos sistemas tras el proceso de segregación de fases. Para realizar las medidas con suficiente resolución temporal y en temperatura, estas medidas de dispersión de rayos X a bajo ángulo se han realizado en la línea española BM16 del sincrotrón europeo ESRF. Los sistemas se han estudiado tanto en el límite de segregación débil, caso del copolímero dibloque formado por poli(estireno) y poli(etil metacrilato) PS-b-PEMA, como en el límite de segregación fuerte como es el formado por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano) (PS-b-PDMS). El sistema PS-b-PEMA se autoensambla mediante calentamiento dando lugar a una estructura laminar en la que el espesor de los dominios puede ajustarse de forma controlada mediante tratamientos térmicos a distintas temperaturas y tiempos. Una vez caracterizada la estructura, la dinámica de las cadenas de poli(etil metacrilato) se ha explorado selectivamente mediante espectroscopia dieléctrica de banda ancha, observándose una ralentización de la dinámica segmental y cambios en la energía de activación aparente de la relajación α por comparación con el homopolímero de poli(etil metacrilato). En colaboración con el grupo del profesor Enrique Vallés de la Universidad Nacional de Sur en Argentina, se ha realizado también el estudio del diagrama de fases de copolímeros dibloque formados por poli(estireno) y poli(dimetil siloxano), mediante dispersión de rayos X a ángulos bajos (SAXS), y la nanoestructura de una serie de los copolímeros di-bloque, (PS-b-PDMS). Los resultados revelan que las muestras con alto contenido en PDMS presentan una morfología laminar mientras que las demás presentan una fase hexagonal de cilindros de PDMS embebidas en una matriz de PS.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 2D

Se ha comenzado un estudio sistemático de la nanoestructura y el desarrollo de la misma en nanofilms de polímeros semicristalinos preparados mediante el método de spin-coating. Los polímeros investigados han sido una familia de poliésteres alifáticos biodegradables y biocompatibles basados en el propilendiol y un diácido con número variable de grupos CH_2 como son polipropileno succinato (PPS), polipropileno glutarato (PPG), polipropileno adipato (PPA) y polipropileno azelato (PPAz). La morfología se ha investigado mediante microscopía de fuerzas atómica (AFM) y dispersión de rayos X con incidencia rasante a ángulos bajos (GISAXS) y altos (GIWAXS). Los experimentos de AFM muestran la existencia de una estructura esferulítica que da estabilidad al film hasta un espesor de 15 nm. Para espesores más pequeños los filmes son inestables y se producen efectos de “dewetting”. Los experimentos de dispersión de rayos X han revelado que en todos los poliésteres investigados salvo en el PPAz los cristales se disponen con el eje de cadena paralelo al sustrato dando lugar a una morfología de tipo “edge-on”. En el PPAz la situación es inversa y la morfología

es de tipo “flat-on”. El efecto repulsivo del segmento alifático frente al sustrato de silicio es responsable de este cambio de morfología.



Imágenes de microscopía de fuerzas atómicas (AFM) mostrando la transición de morfología esferulítica a nano gotas poliméricas de Poly(propileno succinato) (PPS) en nanofilms con espesor decreciente de izda. a dcha.

NANOESTRUCTURACIÓN DE POLÍMEROS EN 1D

Se han preparado plantillas inorgánicas con objeto de confinar y nanoestructurar polímeros en su interior. Debido a la importancia que tiene en este apartado la plantilla hemos acometido la caracterización mediante GISAXS de una serie de membranas de óxido de titanio preparadas mediante deposición física en fase de vapor y con incidencia oblicua (GAPVD). Las membranas consisten en columnas inclinadas con porosidades en el rango de los nanómetros. Ha sido la primera vez que se ha usado GISAXS para la caracterización morfológica de este tipo de membranas.

Se han preparado y caracterizado nanotubos y nanocilindros de polifluoruro de vinilideno (PVDF) obtenidos mediante infiltración de disoluciones poliméricas en membranas porosas de óxido de aluminio con nanoporos cilíndricos. Mediante la técnica de micro-difracción de rayos X con luz sincrotrón (línea ID13 del European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) en Grenoble) se comprobó que el confinamiento espacial del polifluoruro de vinilideno (PVDF) en los poros de la membrana y las interacciones polímero-alúmina inducen una transición de fase parcial de la forma cristalina apolar a la forma ferroeléctrica, así como efectos de orientación de los cristales imponiendo una morfología de tipo “flat-on”.

CARACTERIZACIÓN DE COLOIDES DE INTERÉS BIOLÓGICO Y LIPOPLEXOS

En colaboración con el departamento de Química Física de la UCM, Madrid, se ha realizado un estudio sistemático de la estructuración de liposomas compuestos por un lípido catiónico (DC-CHol) y un zwitteriónico (DOPE) en presencia de ADN. Mediante dispersión de rayos X a bajo ángulo se ha determinado el efecto de la composición lipídica en la estructura de estos lipoplexos y se ha comparado con el diagrama de fases teórico obteniéndose un acuerdo muy satisfactorio.

INVESTIGACIÓN DE LA CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA EN MATERIALES COMPUESTOS POLIMÉRICOS CON NANOFIBRAS DE CARBONO ÓPTIMAMENTE DISPERSADAS

Se ha llevado a cabo la funcionalización de nanofibras de carbono (GANF, suministradas por la empresa Grupo Antolín Ingeniería, SA) con diferentes reactivos: amoníaco, ozono y ácido nítrico. A continuación, se han preparado materiales compuestos poliméricos constituidos por poliamida 66 (PA66) y diferentes cantidades de GANF funcionalizada. Para ello, se han seguido diferentes métodos de procesado: mezclado en fundido, por disolución y polimerización *in situ*. Los materiales se han caracterizado morfológicamente (microscopía óptica, SEM) y también se han determinado sus propiedades térmicas (DSC) y eléctricas (espectroscopia dieléctrica). Los resultados obtenidos se han comparado con los correspondientes a las nanofibras sin tratar. Se ha concluido que con el proceso de funcionalización las propiedades no sólo no mejoran sino que, como en el caso de las eléctricas, incluso empeoran. La explicación a este hecho podría ser la rotura que experimentan las fibras durante el tratamiento, lo que conduciría a una disminución de la relación de aspecto. Para cumplir el objetivo del proyecto PET2007_0186_03, en el que se contempla la optimización del procedimiento para la obtención de materiales con buenas propiedades conductoras a bajos niveles de carga, se ha desarrollado un nuevo método que consiste en esencia en la mezcla física de la matriz polimérica, en forma de polvo y la nanofibra de carbono y posterior moldeo. De esta forma, hemos preparado sistemas compuestos que presentan buena propiedades eléctricas con umbrales de percolación muy inferiores a los conseguidos por el procedimiento de procesado en fundido, que tradicionalmente viene empleándose en la industria del sector.

SIMULACIÓN Y EXPERIMENTOS DE LOS PROCESOS DE POLIMERIZACIÓN Y LOS FENÓMENOS FÍSICOS EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Catalizadores y polimerización.

Experimentalmente se ha mostrado que los catalizadores aldimino PymNox (Ni²) son incapaces de incorporar monómeros polares tales como el MA, mientras que los catalizadores Ni¹ metil-sustituidos (acetaldimino PymNox) son capaces de copolimerizar. La reactividad de ambos catalizadores ha sido examinada mediante modelos DFT. Se propone un mecanismo de Curtin-Hammett para explicar la diferente reactividad de ambos catalizadores en la copolimerización de etileno/MA. Los resultados indican que los sustituyentes metilo en Ni¹ introducen un impedimento estérico que al

catalizador más adecuado para la incorporación de monómeros polares. Este modelo da nuevas pistas para el diseño de catalizadores de copolímeros polares basados en etileno.

Dinámica molecular en el fundido y procesos de cristalización.

Se han diseñado simulaciones Monte Carlo (MC) de las dimensiones moleculares y de la dinámica del fundido de cadenas de polímeros lineales y con ramificaciones corta (SCB) con el fin de establecer el efecto de la arquitectura molecular en las propiedades del fundido. Esta estrategia permite evaluar la densidad y el empaquetamiento intermolecular en el fundido mediante un mapeo de las simulaciones MC en el modelo de longitud de empaquetamiento. Los resultados obtenidos ilustran la dependencia de las dimensiones de cadena, propiedades de enmarañamiento y tiempos de relajación característicos con la arquitectura molecular en consonancia con los resultados experimentales. Por otra parte, se han realizado simulaciones de dinámica molecular sobre proceso de cristalización en disolución para diferentes grados de polietileno. Esta estrategia fue diseñada para entender el papel de las SCB en la formación de dominios ordenados. La temperatura de cristalización, la cristalinidad y la densidad en las simulaciones disminuyen al aumentar el número de ramificaciones, en buen acuerdo con los experimentos. La formación de orden en los copolímeros se ve afectado por la cantidad de SCB en la cadena. En las simulaciones las SCB se mueven hacia la superficie de plegado. En todos los casos, se observa que las ramas C_4 se excluyen de las regiones ordenadas, coincidiendo con los resultados experimentales.

MOVILIDAD, ORDEN Y NANOESTRUCTURA EN SISTEMAS MACROMOLECULARES

Se ha realizado un exhaustivo estudio sobre las propiedades físicas de modelos moleculares de poliolefinas sus mezclas tanto en el estado fundido como en el estado sólido. El estudio de las propiedades en el fundido de los modelos homogéneos ha permitido distinguir y separar entre efectos de características moleculares que normalmente se confunden: las colas de alto peso molecular y la ramificación de cadena larga. En este contexto se pueden establecer correlaciones, que, apoyadas por los resultados obtenidos en simulaciones atomísticas, permiten explicar el comportamiento de los materiales a partir de sus propiedades moleculares. En cuanto a las propiedades en el estado sólido se ha llevado a cabo un estudio exhaustivo mediante calorimetría diferencial de barrido, rayos X de ángulo alto, espectroscopía Raman y análisis dinamo-mecánico que permite ahondar sobre el conocimiento de la compleja estructura de fases de estos sistemas modelo, que puede ser modulada en función de su arquitectura molecular, y de la que dependerán por tanto las propiedades finales.

SIMULACIÓN DE SISTEMAS BIOMACROMOLECULARES

Los receptores de cannabinoides CB1 y CB2 son una clase importante de proteínas transmembrana involucradas en un buen número de procesos biológicos. A pesar de su inherente similaridad estos receptores se encuentran en diferentes entornos celulares, CB1 localizado en el cerebro y CB2 en células asociadas al sistema inmunitario. Además, la actividad de CB1 ha sido asociada a la presencia de rafts lipídicos al contrario que CB2. Se ha llevado a cabo una simulación de dinámica molecular de varios nanosegundos sobre las conformaciones inactivas de ambos receptores insertados en una bicapa lipídica de POPC. La estructura global de la proteína se mantiene a lo largo de la simulación en ambos casos, pero se han observado importantes diferencias en la interacción lípido-proteína. CB1 tiende a distorsionar la regularidad de la bicapa lipídica, especialmente en la zona extracelular, mientras que CB2 presenta una influencia menor en la distribución de lípidos en el plano de la bicapa. Esta observación es consistente con algunos hechos experimentales relacionados con la interacción lípido-proteína en estos receptores de cannabinoides. Por otro lado, se ha realizado un muestreo por simulación del dipéptido de alanina en disolución empleando la plataforma de computación ciudadana Ibercivis. La presencia de conformaciones tipo Y es un resultado inesperado que resulta ser confirmado mediante cálculos mecano-cuánticos y datos experimentales de cristalografía de rayos X y RMN en disolución de fragmentos proteicos presentes en la base de datos de fragmentos aleatorios de proteínas. El acuerdo entre los mapas de Ramachandran simulados y experimentales es excelente.

BIOFÍSICA: ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL E HIDRODINÁMICA DE PROTEÍNAS Y COMPLEJOS BIOMACROMOLECULARES

El estudio de la estructura y propiedades biofísicas de macromoléculas biológicas como las proteínas permite obtener información sobre cuál es su función en su contexto biológico. Con este fin, se han estudiado proteínas relacionadas con cascadas de señalización celular eucariota mediante las técnicas de microscopía electrónica tridimensional y dispersión de luz dinámica. Gracias a estos estudios hemos podido aportar información sobre las dimensiones globales de estos complejos macromoleculares e identificar como se organizan en el espacio. Las macromoléculas sometidas a estudio están implicadas en procesos tan importantes para la célula como son procesos de detección de señales externas, adaptación al medio y transformación celular. El estudio estructural de estas macromoléculas biológicas nos permitirá arrojar luz sobre como realizan sus funciones en la célula.

CHAPTER 2B
RESEARCH ACTIVITIES

RESEARCH LINES:

- Simulation of polymer reactions and of physical properties of polymers.
- Physical properties and nanostructure of polymers.
- Polymer Physics: Order and mobility in macromolecular systems.
- Application of the synchrotron light to the study of polymers and nanostructured materials.
- Interfaces.

RESEARCH SUBLINES:

- Nanostructure of polymer thin films.
- Polymer nanocomposites: Structure and physical properties.
- Confined structure and dynamics in Soft Matter.
- Structure of colloids and lipoplexes
- Microdeformation processes, relation to the nanostructure and optimization of the mechanical properties.
- Early stages of polymer crystallization under shear deformation.
- Nanostructure of multilayer materials by means of Ultra Small Angle X-ray scattering.
- Structure development and properties of natural polymers and nanocomposites.
- Recrystallization processes in semirigid systems.
- Pre-crystallization phenomena, crystallization and phase transitions in synthetic and natural polymers.
- Study of polymerization reaction by quantum mechanical calculation.
- Hierarchical simulation of molecular dynamics.
- New polyolefins with controlled architecture: structure and properties.
- Molecular dynamics and viscoelastic properties.
- Extrusion and elongational processes in polyolefin blends.
- Molecular dynamics and dielectric properties.
- Structure-dynamics -relationships in soft and polymeric condensed matter.
- Transmission electron microscopy: Structural tri-dimensional study of biological macromolecules.
- Biophysics.

TECHNIQUES:

- Scattering and diffraction of X-rays at Wide (WAXS), Small (SAXS), and Ultra-Small (USAXS) Angles and with grazing incidence (GISAXS) including micro- and nano-beam with synchrotron radiation.
- Scanning Differential Calorimetry.
- Incoherent quasielastic neutron scattering.
- Optical microscopy. Scanning electronic microscopy.
- Raman Spectroscopy.
- Micro and nano hardness.
- Neutron Scattering.
- Broad band dielectric spectroscopy.
- Shear rheometry in continuous dynamic torsion.
- Capilar extrusion and elongational rheometry.
- Dynamic mechanical analysis under flexural deformation.
- Dynamic mechanical analysis under tensile deformation: elastic modulus.
- Analysis by crystallization temperature fractionation (CRYSTAF).
- Scanning/transmission electron (STEM) and atomic force (AFM) microscopies.
- Size exclusion chromatography (SEC) and multi angle laser light scattering (MALLS) at high temperatures.
- Dynamic light scattering (DLS).

RESEARCH ACTIVITY:

STUDY OF THE NANOSTRUCTURE AND THE THERMAL STABILITY OF MULTILAYERED AMORPHOUS POLYMER FILMS

The nanolayered structure of a forced-assembly of two immiscible amorphous polymers, prepared by layer-multiplying coextrusion, has been analyzed for the first time by means of USAXS. The experimental long spacings for the series of PMMA/PS films studied show a good correlation with the nominal periodicity values of the stacks. In addition, the long spacings, derived from a localized area in AFM, are also in good agreement with the

USAXS values averaged over much larger areas. The structural variation, after thermal treatment, of two samples with nominal periodicities of around 200nm has been reported. In the range RT-140°C, the nanolayered structure is mostly well preserved as evidenced by AFM. However, the absence of USAXS maxima after annealing at temperatures included in the above range has been tentatively explained by interfacial coarsening and spinodal dewetting occurring between the forced-assembled polymer layers. Above 140°C, the interfacially driven break-up of the layers ends up with the final disappearance of the multilayered structure.

FINITE SIZE EFFECTS IN MULTILAYERED POLYMER SYSTEMS: DEVELOPMENT OF CRYSTALLINE LAMELLAE UNDER PHYSICAL CONFINEMENT

The glass transition temperature and the crystallization behaviour of poly(ethylene terephthalate) PET ultra-thin layers (a few tens of nm) within multilayered PET/polycarbonate (PC) coextruded films have been investigated as a function of layer thickness by means of calorimetric measurements. Results have been discussed in terms of reduced thickness and interface effects. The appearance and evolution of lamellar orientation upon isothermal crystallization of ultra-thin PET layers from the glassy state have been explored based on real time small-angle X-ray scattering (SAXS) studies. Analysis of the SAXS measurements has revealed that finite size effects hamper the crystallization process. However, the final lamellar structure is similar in both, the nanolayered PET and the bulk material. Results suggest that not only lamellar insertion but also some lamellar thickening contribute to the development of the final lamellar structure. Room temperature SAXS and wide-angle X-ray diffraction (WAXS) measurements indicate that two lamellar populations develop: edge-on lamellae are proposed to appear close to the interphases while flat-on lamellae should be preferentially located in the layers core.

MICROINDENTATION HARDNESS OF NANOSTRUCTURED THERMOPLASTIC MATERIALS

The micromechanical behaviour of various thermoplastics based nanocomposites has been investigated with the aid of the microindentation technique. The materials studied were microphase separated styrene-butadiene block copolymer systems and several thermoplastics reinforced with nano-sized fillers having variable dimensionality. It has been found that the microhardness behaviour of the nanocomposites studied is strongly influenced by the dimensionalities of the filler. Due to large surface to volume-ratio one- and two-dimensional fillers exhibit a far better reinforcing behaviour than the three dimensional ones. In case of nanostructured block copolymers, the microhardness is not determined by the total polystyrene (PS)/polybutadiene (PB) composition alone but diminishes gradually in presence of freely standing dangling polybutadiene chains even if the morphology of the systems remains unaltered.

NANOSTRUCTURE AND MORPHOLOGY OF NYLON/GRAPHENE NANOFIBRES

The morphology and nanostructure of a series of nylon/graphene membranes produced by electrospinning were investigated as a function of graphene content. X-ray diffraction studies revealed that the pure nylon 66 nanofibres exhibited reduced degree of crystallinity levels, smaller lateral crystal sizes and thinner crystals than the analogous material prepared by compression moulding. The degree of graphene incorporation within the nanofibres was investigated using electron microscopy. X-ray diffraction studies revealed that the addition of graphene induced significant changes in the crystalline structure of the polyamide. Indeed, the distance between the (100) planes of the triclinic unit cell of nylon 66, associated to the strength of the hydrogen bonds between adjacent molecules, was found to gradually increase as a function of graphene content.

STRUCTURE AND MICROMECHANICAL PROPERTIES IN BLENDS OF RECYCLED POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) WITH POLYOLEFINS. EFFECT OF THE COMPATIBILIZER SEBS-MAH

We have investigated binary blends of recycled poly(ethylene terephthalate) PET with isotactic poly(propylene) iPP and with high density poly(ethylene) HDPE, prepared in the University of Sétif (Algeria). Both types of blends are incompatible. However, the addition to these blends of SEBS-MAH (block copolymer styrene-ethylene/butylene-styrene grafted with maleic anhydride) in different amounts gives rise to their compatibilization. This is demonstrated through the study of the blends carried out by means of wide-angle X-ray scattering (WAXS), differential scanning calorimetry (DSC) and microhardness measurements. Moreover, the effect of the addition of different amounts of clay to these blends has been described. In case of the compatibilized PET/iPP blends, the clay seems to have a nucleating effect on the iPP component, these blends increasing their crystallinity and microhardness. On the contrary, the crystallinity in all the PET/HDPE blends (pure, with compatibilizer, or with compatibilizer plus clay) depends only on their composition.

MICROMECHANICAL PROPERTIES-NANOSTRUCTURE RELATIONSHIP IN BIODEGRADABLE ALIPHATIC POLYESTERS

The biodegradable aliphatic polyesters have been synthesized by Prof. Kricheldorf and co-workers (University of Hamburg, Germany). The samples have been characterized by wide- and small-angle X-ray scattering (WAXS and SAXS), DSC and microhardness measurements. The values obtained for the crystallinity degree and the crystal thickness of the polyesters have been correlated with their microhardness. The different thermal and mechanical properties exhibited by these polyesters compared to the aromatic ones are explained by the different chemical natures of the monomeric units.

STUDY OF COMPOSITES BASED ON ISOTACTIC POLYPROPYLENE iPP WITH CLAY OR TITANIUM DIOXIDE, TiO₂

These composites have been prepared in the University of Dhaka (Bangladesh). Their study has been carried out by several techniques: WAXS, SAXS, DSC and microhardness measurements. The results obtained indicated that the microstructure and the mechanical properties of the pristine iPP, as well as those of the composites, are affected by the processing temperature of the material and by the cooling rate from the molten state. In case of slowly cooled composites, the presence of increasing amounts of additive provokes a decrease of, both, the iPP crystallinity and the microhardness of the material. This effect is notably higher for the clay- containing samples. In the quenched composites prepared with clay, the iPP crystallinity increases when the clay content increases. However, the iPP/TiO₂ samples show the opposite behavior. The microhardness in the quenched composites increases with the additive amount, no matter which the additive is.

SOME INTERESTING ASPECTS OF THE REVERSIBLE CROSSLINKING OF THE ISOTACTIC POLYPROPYLENE

This is an extension of our previous line of research. Isotactic polypropylene iPP has been reversibly crosslinked according to the method developed by Dr. Bouhelal (University of Sétif, Algeria). In collaboration with other groups of research, we have performed 4 parallel studies on the reversible crosslinked isotactic polypropylene, which we will call XiPP: Influence of 1) the content of the crosslinking agent and 2) the repeated crosslinking process in the microstructure of the XiPP; 3) possibility of using these compositions as “master batches” to improve the properties of the iPP, even of the degraded one; and 4) effect of the number of extrusion cycles on the XiPP properties. The techniques used to characterize the samples have been: WAXS, DSC, dynamic mechanical thermal analysis (DMTA), ¹³C nuclear magnetic resonance (¹³C NMR), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and melt flow index (MFI) measurements. The results obtained demonstrate that the microstructure of iPP does not experience important changes neither by the addition of crosslinking agents in different amounts, nor after being subjected to repeated crosslinking processes, what supposes a higher number of extrusion cycles. Moreover, it is evidenced the possibility of using an XiPP with a fixed crosslinking degree as a “master batch”, that can be added to the unmodified iPP in different proportions.

NANOSTRUCTURING POLYMERS IN 3D

Through nanoparticles. We have used carbon nanotubes as templates to control the intrinsic nanostructure of semicrystalline polymers with the aim of improving the physical properties of the nanocomposite. Precisely, by in-situ polymerisation, nanocomposites of Poly (ethylene terephthalate) (PET) and carbon nanotubes single wall (SWCNT) as an additive were prepared. It is found that the undulations of the structure of the nanotubes have an influence on the mechanical properties, in addition a certain degree of SWCNT aggregation improve optical properties and increase the electrical conductivity. Also, in this line, we have investigated the segmental dynamics of natural and vulcanized rubber in a series of nanocomposites with nanoclay. The results show that neither the concentration nor the type of clay changes the segmental dynamics, related to the viscosity of the system. By contrast the dynamics of the chain, connected to the flow, is slowed by the presence of nanoclay. We attributed this effect to the presence of natural rubber chains at the interface rubber / clay. Within this framework, in collaboration with the group of polymers and micro-fluidics of the department of Chemical Engineering of the Imperial College London (London, United Kingdom) we have studied dynamic properties of a family of nanocomposites consisting of poly(styrene) and C60 nanoparticles. The main experimental tools to tackle this challenge were based on neutron scattering at different space-time scales, calorimetry and dielectric spectroscopy, in order to investigate structural and dynamic aspects of polymer nanocomposites. We find that the fullerene nanoparticles increase the glass transition temperature, slowing down the a relaxation dynamics associated with glass formation, while at the same time cause a softening of the material at high frequencies (as determined by the Debye–Waller factor). These effects are interpreted in terms of the particle modifying the polymer packing, causing an increase of the fragility of glass formation. Our measurements, in combination with previous work, demonstrate that the fragility of glass formation can be tuned through the judicious choice of nanoparticles, an effect which has numerous implications for the mechanical properties, permeability and other basic properties of polymer nanocomposites. Also, by ultra low angles X-ray scattering (USAXS), we have studied the influence that

the particle type, has on the rheology of a polymer matrix. In this case the nanoparticles are iron oxides and interpenetrating polymer networks matrices of poly (N-isopropylacrylamide) (PNiPAAm). The combination of USAXS and rheology has allowed to identify when the iron oxide particles are bonded to the polymer matrix and when they are just embedded in it.

Semicrystalline polymers. In the frame of studies aimed at elucidating the interrelation between the intrinsic nanostructure of semicrystalline and polymer segmental dynamics we have investigated by simultaneous X-ray scattering and dielectric spectroscopy, crystallization of the Poly (trimethylene terephthalate) (PTT). The simultaneity of the two measures allow us to elucidate the effect that crystal formation has on the molecular dynamics of the remaining amorphous phase. This dynamic is responsible for the mechanical properties at room temperature of most semi-crystalline polymers. PTT is an aromatic polyester with better physical and processing properties in comparison with PET, commonly used in industry today. Our experiments show that the structural homogeneity, reflected in the distribution of crystalline phase embedded in the amorphous phase is better than in PET.

Self-assembly in diblock copolymers. The phase diagrams of block copolymers have been studied by X-ray scattering at low angle (SAXS) and differential scanning calorimetry (DSC). By SAXS measurements we have determined the temperatures of order-disorder transition and the morphologies adopted by these systems after the segregation of phases. To measure with sufficient temporal resolution and temperature, Small Angle X rays scattering measurements were carried out in the Spanish line BM16 at the European Synchrotron ESRF. We have studied systems in the weak segregation limit, as the diblock copolymer composed of poly (styrene) and poly (ethyl methacrylate), and in the strong segregation limit formed by poly (styrene) and poly (dimethyl siloxane). The PS-b-PEMA self-assembles by heating resulting in a layered structure in which the thickness of the domains can be adjusted controlled by heat treatments at different temperatures and times. Once the structure is characterized, the dynamics of chains of poly (ethyl methacrylate) has been explored selectively using broadband dielectric spectroscopy, showing a slowing of the segmental dynamics and changes in apparent activation energy of the α relaxation compared with that of the homopolymer poly (ethyl methacrylate). The study of diblock copolymers of PS-PDMS has been done in collaboration with the group of Prof. Enrique Vallés (National University in South Argentina), The results reveal that the samples with high content of PDMS present a lamellar morphology while others have a hexagonal phase PDMS cylinder embedded in a PS matrix.

2D NANOSTRUCTURING POLYMERS

A systematic study of the nanostructure and development of it in semi-crystalline polymers nanofilms prepared by spin-coating method has been started. The polymers investigated were a family of biodegradable and biocompatible aliphatic polyesters based on propylendiol and a variable number of CH₂ groups in the monomer such as propylene succinate (PPS), polypropylene glutarate (PPG), polypropylene adipate (PPA) and polypropylene azelate (PPAZ). The morphology was investigated by atomic force microscopy (AFM) and grazing incidence X-ray scattering at low (GISAXS) and high angles (GIWAXS). AFM experiments show the existence of a spherulitic structure that provides stability to the film to a thickness of 15 nm. For smaller thicknesses the films are unstable and dewet. The experiments of X-ray scattering revealed that in all investigated polymers except PPAZ, crystals are arranged with the axis parallel to the substrate polymer, resulting in a morphology of type "edge-on." In PPAZ the situation is reversed and the morphology is a "flat-on." The repulsive effect of the aliphatic segment compared to the silicon substrate is responsible for this change of morphology.

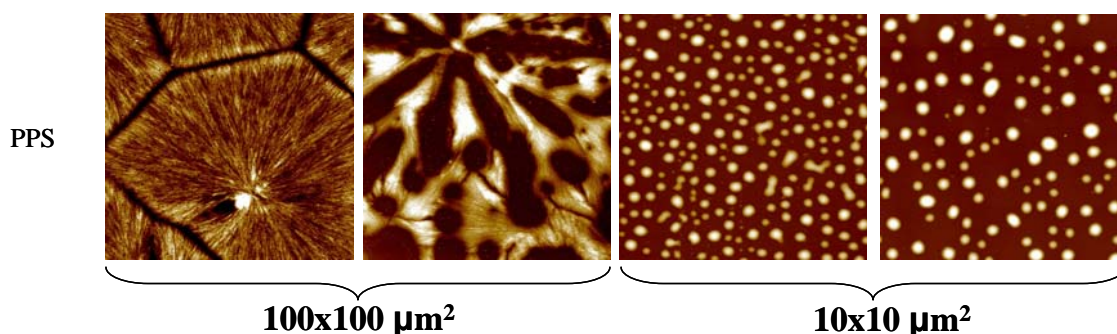


Image showing the transition from spherulitic morphology to polymeric nanodroplets in nanofilms of poly(propylene succinate) (PPS) for different thicknesses decreasing from left to right.

1D NANOSTRUCTURING POLYMERS

Inorganic templates have been prepared in order to confine polymer nanostructures inside. Because of the importance of the confining media, the inorganic template used to confine and therefore produce polymeric nanotubes or nanorods, we have undertaken the characterization by GISAXS of a series of titanium oxide membranes prepared by physical deposition vapor phase and oblique incidence (GAPVD). The membranes consist of inclined columns with porosities in the range of nanometers. It was the first time GISAXS has been used for morphological characterization of such membranes.

Nanotubes and nanorods of polyvinylidene fluoride (PVDF) obtained by infiltration of polymer solutions in porous membranes aluminum oxide with cylindrical nanopores has been characterized. In this case we have demonstrated that wetting of the walls of alumina by the polymer solution produce, after solvent evaporation, the formation of nanorods of PVDF with a ferroelectric crystalline structure supported by a non-ferroelectric PVDF. The system was investigated using X-ray diffraction with microfocus and synchrotron light line ID13 of European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble, France. The results indicate that the interaction polymer / alumina type imposes a "flat-on" morphology.

CHARACTERIZATION OF COLLOIDS OF INTEREST BIOLOGICAL AND LIPOPLEXES

In collaboration with the Department of Physical Chemistry at the UCM a systematic study on the structure of liposomes composed of a cationic lipid (DC-Chol) and zwitterionic one (DOPE) in the presence of DNA was conducted. Using X-ray scattering at low angle the effect of lipid composition on the structure of these lipoplex has been established and compared with the theoretical phase diagram, with a very satisfactory agreement.

INVESTIGATION OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY IN POLYMER COMPOSITES WITH CARBON NANOFIBERS OPTIMALLY DISPERSED

Carbon nanofibers (GANF, supplied by Grupo Antolín Ingeniería SA) have been functionalized with three reagents, namely, ammonia, ozone and nitric acid. Then, polymer composites based on polyamide 6,6 (PA66) and different amounts of functionalized carbon nanofibers have been prepared following different methods: melt compounding, in-situ polymerization and solvent-aided mixing. The materials have been characterized morphologically (light microscopy, SEM) and their thermal (DSC) and electrical (dielectric spectroscopy) properties have been determined. The data have been compared with those obtained with neat carbon nanofibers. From the results, we conclude that the treatment of the fibers does not introduce improvements in the properties of the nanocomposites. Even more, the electrical behaviour is worse. This fact can be explained if we consider that the nanofibers are broken during the process of functionalization and, as a result, the aspect ratio decreases. In order to obtain systems based on PA66 and GANF with good electrical properties at low percolation thresholds, as it is proposed in the project PET2007_0186_03, we have developed a new procedure that consist essentially of the physical mixing of the polymer matrix, in the form of powder, and the corresponding amounts of CNF. The materials obtained following our procedure present good electrical conductivity at very lower percolation thresholds than those corresponding to systems prepared by melt compounding, which is the method commonly used in the industry

SIMULATION AND EXPERIMENTS OF POLYMERIZATION AND PHYSICAL PHENOMENA IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

Catalysts and polymerization.

Experimental results show that the unsubstituted catalyst Ni² (aldimino PymNox catalyst) is unable to incorporate MA monomer, whereas the methyl substituted Ni¹(acetaldimino PymNox catalyst) is able to achieve copolymerization. The reactivity of both catalysts was examined using Density Functional Theory (DFT) models. Thus, a Curtin-Hammett mechanism is proposed to explain the different reactivity of both catalysts in the ethylene/MA copolymerization. Our results indicate that the methyl substituent Ni¹ introduces additional steric hindrance that renders a more suitable catalyst conformation for polar monomer incorporation. This model provides insights into the design of new catalysts to produce polar functionalized copolymers based on ethylene.

Melt macromolecular dynamics and crystallization.

Full Monte Carlo atomistic computer simulations (MC) and experiments of the molecular dimensions and melt dynamics of entangled linear and short chain branched (SCB) polyethylene chains were designed to establish the effect of the molecular architecture on the melt dynamic properties. This strategy allows one to evaluate the density and the intermolecular local packing (chain size) in the melt by mapping of MC simulations on the packing length model. The results obtained illustrate the dependence of the chain dimensions, the entanglement features, and the characteristic relaxation time of the transition with the molecular architecture of polyethylene for short chain branching content between 0 and 55 per 1000 carbon atoms.

Molecular dynamics simulations and experiments of solution crystallization of different PE grades have been performed. This strategy was designed to understand the role of the short chain branches (SCB) on the formation

of ordered domains. The crystallization temperature, crystallinity and density calculated from simulations decrease as the number of branches increases as it has been experimentally seen. The formation of order in the copolymers is affected by the amount of the SCB in the backbone of the polymer chain. In the simulations initially the SCB move to the folding surface. Once the SCB are located near the folding surface the order starts to grow. In all cases here shown, the C₄ branches are excluded from the ordered domains in agreement with experimental results.

MOBILITY, ORDER AND NANOSTRUCTURE IN MACROMOLECULAR SYSTEMS

The study of the physical properties in the melt of molecular models of polyolefins has allowed distinguishing the effects of two molecular parameters in the viscoelastic properties; high molecular weight tails and long chain branching. These molecular features cause a similar effect in the linear viscoelastic response. In this context, it is possible to establish correlations, which together with the entanglement parameters found from atomistic simulations, can be applied to reproduce the viscoelastic fingerprint of the models from their molecular features. In what the nanostructure and solid state properties concerns, an exhaustive study of the semicrystalline molecular models has been performed using differential scanning calorimetry, wide angle X-ray scattering, Raman spectroscopy and dynamic-mechanical analysis. The results obtained allow getting a deeper understanding about the complex nature of the phase structure of the semicrystalline polymers and on the relationship between nanostructure and macroscopic physical properties.

SIMULATION OF BIOMACROMOLECULAR SYSTEMS

Cannabinoid receptors CB1 and CB2 are an important class of transmembrane proteins involved in a number of important biological processes. In spite of the inherent similarity (40% in aminoacid sequence) these receptors are found in different cell environments, CB1 is located in certain parts of the brain whereas CB2 can be found in cells associated to the immune system. In addition to this, CB1 activity has been intimately associated to lipid rafts whereas CB2 has not. We have performed a multianosecond molecular dynamics simulation of the inactive conformations of both receptors inserted in a POPC lipid bilayer. The overall protein structure is maintained along the simulation in both cases but we have noticed important differences in the protein-lipid interaction. CB1 tends to distort the lipid bilayer regularity, especially in the extracellular moiety, whereas CB2 has a minor influence on the lipid distribution along the plane of the bilayer. This observation is consistent with some experimental facts about these cannabinoid receptors regarding lipid/protein interaction.

Additionally, an exhaustive umbrella sampling simulation of the alanine dipeptide in solution was carried out in the volunteer distributed computing platform Ibercivis. The presence of unexpected Y conformations in solution is assessed by both quantum calculations and experimental data from X-ray and NMR protein-solved structures available in the protein random coil library. The agreement between experimental and simulation Ramachandran plots of the dipeptide in solution is excellent.

BIOPHYSICS: TRIDIMENSIONAL STRUCTURE AND HYDRODYNAMICS OF PROTEINS AND BIOMACROMOLECULAR COMPLEXES

The study of structure and biophysical properties of biomacromolecular complexes as proteins leads to a deeper knowledge about their function in their biological context. With this purpose in mind we have studied proteins implicated in eukaryotic signalling pathways by three dimensional electron microscopy and dynamic light scattering. Our results have shown the global dimensions of these macromolecular complexes and have described their spatial arrangement. The macromolecules studied are involved in important cell processes as external signal detection, environment adaptation and cellular transformation. The structural analysis of these biomacromolecules will shed light on how they work into the cell.

CAPÍTULO 3
PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

CHAPTER 3
RESEARCH PROJECTS

Estructura, dinámica y sus interrelaciones en materiales poliméricos nanoestructurados en una, dos y tres dimensiones.

Code or Reference: MAT2009-07789.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2010-December 2012.

Objectives: To advance in the understanding of the underlying physics soft matter nanostructuring.

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

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20060160.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: January 2007-December 2010.

Objectives: To investigate the potential use of carbon nanotubes as templates in polymer nanocomposites.

Visualización y simulación de la influencia del plegado macromolecular en la formación de cristales poliméricos y en la funcionalidad de proteínas.

Code or Reference: MAT2009-12364.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

Duration: 2010-2012.

Objectives: This project is focussed on the determination of the role of the macromolecular folding in the formation of polymer single crystals and co-crystallisation of linear and branched macromolecules, and also on the conformational changes in proteins as a consequence of the interaction with ligands.

Fundamentos de la nanoestructuración volúmica y superficial de copolímeros en bloque.

Code or Reference: MAT2008-03232/NAM.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Aurora Nogales.

Duration: January 2009-December 2011.

Objectives: Study of the fundamentals that determine volume and surface nanostructuring in block copolymers.

Nanoestructuras poliméricas multilaminares: aproximación a un apilamiento de láminas bidimensionales. / Multilayered Polymer Nanostructures: an Approach towards Stacked Two-dimensional Layers.

Code or Reference: FIS2007-60534.

Funding Institution: MEC.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Duration: November 2007-November 2010.

Objectives: Study of nanolayered systems, composed by an alternate stack of thin layers of two immiscible homopolymers, covering, both, the detailed analysis of the layered nanostructure and the changes brought about by this peculiar architecture on several physical properties, specially as layer thickness decreases below a critical value (confinement in one dimension).

Propiedades viscoelásticas de sistemas poliméricos nanoestructurados mediante nanoindentación

Code or Reference: FIS2010-18069.

Funding Institution: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Main Researcher: Fernando Ania García.

Resolution: 4th of October 2010. *Duration:* 1st January 2011- 31st December 2013.

Objectives: The general objective of the present project is to study finite size effects on the physical properties of nanostructural polymer systems such as: thin films, polymer composites and copolymers. The mechanical properties derived from nanoindentation, together with microcalorimetry data, will be compared to the values associated to the bulk.

Estudio de la microestructura de nanocomposites basados en materiales poliméricos modificados mediante extrusión reactiva.

Code or Reference: A/027399/09

Funding Institution: Spanish Agency of International Cooperation for the Development (AECID)-MAEC

Main Researcher: M^a Esperanza Cagiao Escotado.

Duration: January 2010-January 2011

Objective: Study of thermoplastic polymers reversibly crosslinked in the molten state by reactive extrusion. Application

of this method to the preparation of polymer/clay nanocomposites.

Nanofibras y nanotubos poliméricos: Efectos de confinamiento en la estructura y propiedades físicas.

Code or Reference: PIE 200950I088.

Funding Institution: CSIC.

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: January 2010-December 2010.

Objectives: Investigation of the confinement effects on the structure and physical properties of polymer nanofibers and nanotubes.

Nanostructuring polymers in one and two dimensions.

Code or Reference: II-20100103 EC.

Funding Institution: Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY HASYLAB, Hamburg (Germany).

Main Researcher: Mari Cruz García Gutiérrez.

Duration: June 2010-June 2012.

Objectives: Structural studies of confined systems by means of grazing incidence X-ray scattering with synchrotron light.

Investigación de la conductividad eléctrica en materiales compuestos poliméricos con nanofibras de carbono óptimamente dispersadas.

Code or Reference: Proyecto PETRI (PET-2007-0186-03).

Funding Institution: MICINN.

Main Researcher: Amelia Linares Dos Santos.

Duration: January 2008-December 2010.

Objectives: Study of the electric properties of polymeric composites materials with carbon nanofibers prepared by different methods.

Study of polymer Nanostructures under Confinement as Revealed by WAXS, SAXS and USAXS.

Code or Reference: Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) II-20070031.

Funding Institution: EU.

Main Researcher: Francisco J. Baltá Calleja.

Duration: 2007-2011.

Objectives: Structural studies of multilayered systems by means of X-ray synchrotron radiation.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA / PROJECTS WITH THE INDUSTRIAL COMPANIES

Study of the molecular effects on the kinetics of melt miscibility between LLDPE and LDPE, and its modification with external means. II.

Company: DOW Chemicals Ibérica.

Main Researcher: Javier Martínez de Salazar Bascañana and Juan Francisco Vega Borrego.

Duration: 1 January 2009-30 April 2010.

Objectives: The fundamental aspects of this project are directed towards the study of the rheological behavior of molten blends of linear low density polyethylene and other polyolefins, and its correlation with the molecular structure and the properties of the components.

Cenit InfiniTex: Investigación de nuevas funcionalidades e inteligencia implementadas en textiles.

Company: Francisco Albero, S.A. (FAE, S.A.).

Main Researcher: Tiberio A. Ezquerro Sanz.

Duration: July 2010-July 2012.

Objectives: To implement functionality in different types of textiles and composite materials aiming to achieve self-regulating properties.

CAPÍTULO 4
COOPERACIÓN CIENTÍFICA

CHAPTER 4
SCIENTIFIC COOPERATION

Users' Meeting 2010 & Associated Workshop, ESRF, Grenoble (France), 9-12th of February 2010.

- *A microdiffraction study on the confinement effects in one-dimensional polymer arrays* (Invited lecture), Mari Cruz García-Gutiérrez.

14th Symposium Nanostructured Polymers / Nanocomposites, Martin Luther University, Halle (Germany), 18th and 19th of May 2010.

- *Development of PET lamellae in nanolayered polymer systems and correlation with micromechanical properties* (Invited lecture), A. Flores, C. Arribas, F. Fauth, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer and F.J. Baltá Calleja and F. Ania.
- *Micromechanical characterization of polymers and nanocomposites relating to nanostructure parameters* (Invited lecture), F.J. Baltá Calleja.
- *The doubling of longitudinal crystal size in nascent UHMWPE powder on sintering* (Invited lecture), L.P. Myasnikova, Y.M. Boiko, F.J. Baltá Calleja, E.M. Ivankova, U. Noechel, V.A. Marikhin, E.I. Radovanova, S. Goerlitz and V. Seidevitz.
- *Micromechanical behaviour of cold-crystallized PET: Influence of re-crystallization on nanostructure and segmental relaxation in the confinement regime* (Invited lecture), M. Pieruccini, G. Di Marco, P. Calandra, A. Flores and F.J. Baltá Calleja.

Workshop on Polymer Crystallization Under Conditions Relevant to Processing, Genova (Italy), 26-29th of May 2010.

- *Effect of nano-additives on the crystallization of polymers after shear flow* (Invited lecture), Aurora Nogales Ruíz.
- *Structure evolution during re-crystallization of low-T cold crystallized PET: The interpretation of X-ray and DMTA data in the light of a new model for segmental relaxation* (Invited lecture), M. Pieruccini, G. Di Marco, A. Flores, U. Nöchel, N. Stribeck and F.J. Baltá Calleja.

International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, Madrid, 29th of June-2nd of July 2010.

- *Simulation of folding processes of single-chain copolymers containing short chain branches* (Invited talk), J. Ramos

XII Simposio Latinoamericano de Polímeros and X Congreso Iberoamericano de Polímeros, San José (Costa Rica), 13-16th of July 2010.

- *Computer modelling of the early crystallization process of single-chain ethylene/1-hexene copolymers from dilute solutions* (Poster), J. Ramos and J. Martínez Salazar.

6th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 7-10th of September 2010.

- *Confined dynamics in semicrystalline polymers: A Dielectric Spectroscopy and Neutron Spin Echo Study* (Oral contribution), A. Sanz, A. Nogales, M. Soccio, N. Lotti and T. A. Ezquerra.
- *Effects of strain induced crystallization on the dielectric behavior of natural rubber* (Oral contribution), M. Hernández, R. Verdejo, M.A. López-Manchado and T.A. Ezquerra.
- *Influence of fragility on polymer cold crystallization* (Poster), A. Sanz, A. Nogales, T.A. Ezquerra
- *Origin of the β relaxation in PVDF based ferroelectric polymers. Confinement effects?* (Poster), A. Nogales, A. Sanz and T.A. Ezquerra.
- *Influence of preparation procedure on the conductivity and transparency of SWCNT polymer nanocomposites* (Poster), J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D.R. Rueda, M. Kwiatkowska, Z. Roslaniec and T.A. Ezquerra.
- *Restricted Segmental Relaxation in Oriented Semicrystalline Poly(vinylidene fluoride) as Revealed by Broad Band Dielectric Spectroscopy* (Poster), A. Linares, A. Nogales, A. Sanz, T.A. Ezquerra and M. Pieruccini.
- *Phase behaviour and dynamics in a symmetric Polystyrene-block-Poly(ethyl methacrylate) Copolymer* (Poster), A. Sanz, D. R. Rueda, T. A. Ezquerra and A. Nogales.
- *Influence of the Crystalline Structure in the Segmental Mobility of Semicrystalline Polymers: Poly(triethylene terephthalate)* (Poster), I. Martín-Fabiani, A. Linares, A. Sanz, A. Nogales and T.A. Ezquerra.
- *Segmental dynamics of semicrystalline poly(vinylidene fluoride) nanorods* (Poster), J. Martín, C. Mijangos, A. Sanz, T. A. Ezquerra and A. Nogales.
- *Multiple phase diagram in supercooled ethanol studied by Simultaneous Dielectric Spectroscopy and Neutron Diffraction* (Poster), A. Sanz, I. Puente-Orench, M. Jiménez-Ruiz, A. Nogales and T. A. Ezquerra.
- *Study of the Electrical Conductivity of Polyamide 66 and Carbon Nanofibers Composites by Dielectric Spectroscopy* (Poster), J.C. Canalda, A. Linares, M.E. Cagiao and T.A. Ezquerra.

4th Conference on Polymer Behavior – IUPAC, Lodz (Poland), 20-23rd of September 2010.

- *Nanostructure and crystallization phenomena of nanolayered crystalline polymer system using synchrotron radiation techniques and indentation methods* (Plenary lecture), F.J. Baltá Calleja and F. Ania.
- (Member of the International Scientific Committee), F.J. Baltá Calleja.

4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30th of September- 1st of October 2010.

- *Simulations of the crystallization process of single chain copolymers from dilute solutions* (Poster), S. Sanmartín Sánchez, J. Ramos, J. Martínez-Salazar.

3rd International Conference on Polyolefin Characterization (ICPC), Shanghai (China), 8-10th of November 2010.

- *Following the Crystallization Process of Polyethylene Single Chain by Molecular Dynamics: The Role of Lateral Chain Defects* (Invited lecture), S. Sanmartín, J. Ramos and J. Martínez-Salazar.
- *Molecular Rheology of Model Ethylene/Styrene Copolymers* (Poster), J.F. Vega, M.T. Expósito and J. Martínez-Salazar.

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL DEPARTAMENTO **VISITORS**

- ❖ **Prof. Djafer Benachour**, LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 30th of May-2nd of June and 30th of November-11th of December 2010.
- ❖ **Dr. Saïd Bouhelal**, LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria, 26th of January-11th of February; 6th of May-15th of July; 16-30th of September and 2-16th of December 2010.
- ❖ **Dña. Loyda Albañil Sánchez**, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 27th of January-26th of April 2010.
- ❖ **Dña. Maraolina Domínguez Díez**, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 27th of January-26th of April 2010.

CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS **INVITED CONFERENCES**

Prof. Jan K. Krüger.

Laboratoire de Physique des Matériaux, University of Luxembourg, Luxembourg.
Photons Meet Sound Waves in Soft Matter.
31st of May 2010.

Dr. Saïd Bouhelal.

LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria.
Preparation and Properties of Reversibly Crosslinked Isotactic Polypropylene/Clay Nanocomposites.
28th of May 2010.

Dr. Juan López Valentín.

Departamento de Química y Tecnología de Elastómeros, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC, Madrid.
RMN de bajo campo aplicado a la ciencia y tecnología de polímeros.
12th of March 2010.

VISITAS DE INVESTIGADORES A CENTROS INTERNACIONALES **VISITS TO FOREIGN INSTITUTIONS** (De una semana o más / Longer than a week)

M^a Esperanza Cagiao Escotado.

- University of Sétif, Sétif, Algiers, 9-16th of November 2010.

M^a José Capitán Aranda.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 9-17th of May 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México, 12-20th of June 2010.

M^a Cruz García Gutiérrez.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 11-20th of November 2010.

Javier Ramos Díaz.

- COMSE Group, Department of Materials Science and Engineering, National Technical University of Athens, Greece, since 1st of November 2009 to 28th of February 2010. José Castillejo fellowship

Francisco J. Baltá Calleja.

- DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 15th of April-3rd of May 2010
- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 4-14th of May 2010.

- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 24th of May-19th of June 2010.
- University of Hamburg, Hamburg, Germany, 24th of June-2nd of July 2010.

Jaime J. Hernández Rueda.

- Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz, Germany, Estancias FPI, May-September 2010.

Sara Sanmartín Sánchez.

- Groupe Théorie et Simulation des Polymères, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France, 1st September-31st of December 2010.

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

CHAPTER 5
TEACHING, OUTREACH AND OTHER
ACTIVITIES

5.1 DOCENCIA / TEACHING

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *Dispersión de rayos X: De los sistemas heterogéneos a las capas delgadas* en el Curso de postgrado: “Aplicación de la radiación sincrotrón a la caracterización de materiales” ICMSE-CSIC y Universidad de Sevilla. 27-29th of October 2010.
1 hour.

Juan Francisco Vega Borrego

- *La red de enmarañamientos en los polímeros: Experimentos, teorías y simulación por ordenador.* Máster en Alta Especialización en Plásticos y Cauchos, Universidad Internacional Menéndez Pelayo-CSIC, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, Madrid, 5th of March 2010.
2 hours.

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS / COURSES AND CONFERENCES

M^a Esperanza Cagiao Escohotado.

- *Reversible crosslinking of isotactic polypropylene: Some interesting aspects.* LMPMP, Faculty of Engineering, Ferhat Abbas University, Sétif, Algeria. 14th of November 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- *Aplicación de la radiación sincrotrón al estudio de sistemas poliméricos nanoconfinados.* Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Cuernavaca, Morelos, México, 16th of June 2010.
- *Correlaciones estructura-propiedades en polímeros mediante técnicas de difracción de rayos-X, micro- y nano-indentación,* Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, México, 18th of June 2010.

Juan Francisco Vega Borrego

- *Size and conformational features of ErbB2 and ErbB3 receptors: a TEM and DLS comparative study,* Sino Biological Ltd., Beijing, China, 12th of November 2010

Javier Ramos Díaz.

- *Modelización y simulación aplicada a la física macromolecular,* LATEP, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid, 16th of June 2010.

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Microindentation hardness studies of polymer surfaces: Non-destructive characterization of biomateriales.* Institute of Polymer Research, GKSS-Research Center, Berlin, Germany, 3rd of November 2010.

Sara Sanmartín Sánchez.

- *Simulations of the crystallization process of different ethylene copolymers in the melt state,* Institut Charles Sadron, Strasbourg, France, 2nd of December 2010.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO / COURSES, CONGRESSES AND SEMINARS ORGANIZED BY THE INSTITUTE

Tiberio A. Ezquerra Sanz and Aurora Nogales Ruíz.

- *Satellite BDS2010 Tutorial Course on Physics of Dielectrics; Basic Principles and Applications,* Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 6th of September 2010.

Tiberio A. Ezquerra Sanz and Aurora Nogales Ruíz.

- *6th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications,* Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 7-10th of September 2010.

Organizing Committee: T.A. Ezquerra and Aurora Nogales (Chairs) and M.C. García-Gutiérrez, Amelia Linares, D.R. Rueda, A. Sanz, J. Hernández, S. Sánchez-Cortés, C. Álvarez, C. León and A. Rivera-Calzada.

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

- Presentación del VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

Victor Cruz Cañas, Javier Ramos Díaz, Javier Martínez de Salazar Bascuñana, Juan Francisco Vega Borrego and Ignacio López (Supercomputation Center of Galicia, CESGA)

- 4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulations (organizers), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 30th of September- 1st of October 2010.

M^a Cruz García Gutiérrez and Raúl Z. Martínez Torres.

- VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular (organizers), Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Caracterización de macromoléculas (polímeros, biopolímeros y proteínas) por cromatografía de permeación en gel (GPC/SEC) y tiple detección TDAmox (organizer), IESMAT/VISCOTEK-Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 29th of October 2010.

Javier Ramos Díaz.

- Física en el mundo de las macromoléculas: desde la simulación por ordenador hasta su visualización, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

Alejandro Sanz Parras.

- Fuentes de neutrones y de luz sincrotrón: Aplicaciones a la física de la materia condensada blanda, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.
- Materia Condensada Blanda: dinámica y estructura a diferentes escalas temporales y espaciales, Ciclo de Seminarios del Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 15th December 2010.

Jaime J. Hernández Rueda.

- Nanoestructuración de películas delgadas poliméricas, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia”, Instituto de Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular, CSIC, 24-26th of March 2010.

Rafael Nuñez Ramírez.

- Estudio estructural de macromoléculas sintéticas y biológicas mediante microscopía electrónica de transmisión, part of the “VII Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia: de las partículas elementales a los sistemas de alto peso molecular”, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 24-26th of March 2010.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS / AWARDS

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

- Member of the *Scientific Advisory Committee* (SAC) of the French Synchrotron SOLEIL (France), since December 2005.
- Member of *Review Panel Committee* "Soft Condensed Matter and Scattering" of HASYLAB, DESY, Hamburg (Germany), since October 2006.
- Member of the *International Dielectric Society Board* of the *International Dielectric Society* (<http://permittivity.org>).
- Member of the *Peer Review Committee 3*, Chemistry, Condensed matter, Nano-chemistry, Soft condensed matter of the French Synchrotron SOLEIL, since January 2008.

- Member of the *Scientific Council (SCO)* of the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Member of *Trusties of Board of Agencia Estatal CSIC*, Ministerio de Ciencia e Innovación, since March 2008.
- Member of the *Committee: Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, since March 1996.
- Member of the *Editorial Board* of the journal “e-Polymer”.
- *Editor Assistant* of the journal “e-Polymer”.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- Member of the *Executive Board* of the Spanish Synchrotron Users Organization (AUSE), since July 2007.
- *Spanish delegate* of the European Synchrotron Users Organization (ESUO), since January 2010.
- CSIC Expert at the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities of the European Union, since January 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat.

- Member of the scientific committee of the POLYCHAR World Forum.

Juan Francisco Vega Borrego.

- Member of the Executive Board of *Grupo Especializado de Reología (GER)* of *Real Sociedad Española de Química (RSEQ)*.

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Honorary Member* of the *Real Sociedad Española de Física*.
- Member of the *Board of the Society for International Studies (SEI)*, Madrid.
- *Honorary Member* of the *Akademie Mitteldeutsche Kunststoffinnovationen*, Merseburg, Germany.
- Member of the *Royal Academy of Sciences*, Barcelona.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Applied Polymer Science”.
- Member of *Editorial Board* of the “International Journal of Polymeric Materials”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Polymer Engineering”.
- Member of *Editorial Board* of the “Journal of Macromolecular Science-Physics”.
- Member of *Editorial Board* of the journal “e-Polymers”.

5.5 ACTIVIDADES Y MATERIAL DE DIVULGACIÓN / OUTREACH **ACTIVITIES AND MATERIAL**

Víctor Cruz Cañas.

Visita al Cluster de Cálculo Científico del CSIC, X Semana de la Ciencia de la CAM.
IEM-CSIC y SGAI-CSIC.
18th of November 2010.

Rafael Núñez Ramírez.

Visita al Microscopio Electrónico de Transmisión, X Semana de la Ciencia de la CAM.
IEM-CSIC y SGAI-CSIC.
18th of November 2010.

5.6 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA / TRANSFER OF **TECHNOLOGY**

Visitas:

Javier Martínez-Salazar y Juan Francisco Vega.

Sino Biological Ltd.
Beijing (China).
11-14th of November 2010.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato.

Empresa Única.

8th of June 2010.

Reuniones de transferencia de tecnología:

Meeting attends: Tiberio A. Ezquerro.

Collaboration: FAE, S.A.

Place: Hospitalet de Llobregat (Barcelona).

Date: 21st of September 2010.

Meeting attends: Nuria Robledo, Juan Francisco Vega y .Javier Martínez de Salazar.

Collaboration: Dow Chemicals Ibérica.

Place: Madrid.

Date: 21st of April 2010.

Meeting attends: Nuria Robledo, Juan Francisco Vega y .Javier Martínez de Salazar.

Collaboration: Dow Chemicals Ibérica.

Place: Madrid.

Date: 7st of July 2010.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto:

Speaker: Nuria Robledo Alvaro.

Title: Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. II.

Collaboration: **IEM/Dow Chemical Ibérica.**

Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Dates: 21th of April 2010.

Speaker: Juan Francisco Vega Borrego.

Title: Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means. II.

Collaboration: **IEM/Dow Chemical Ibérica.**

Place: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Dates: 7th of July 2010.

Informes de transferencia tecnológica:

Nuria Robledo Alvaro, Juan Francisco Vega Borrrego y Javier Martínez-Salazar.

Study of Molecular Effects on the Kinetics of Melt Miscibility between LLDPE/LDPE, and its Modification with External Means.II.

Dow Chemical Ibérica (July 2010).

5.7 UNIDADES ASOCIADAS Y OTRAS ACTIVIDADES /ASSOCIATED UNITS AND OTHER ACTIVITIES

Patentes:

Título: **PROCEDIMIENTO DE OBTENCIÓN DE MATERIALES COMPUESTOS COMO CONDUCTORES ELÉCTRICOS.**

Autores: **A. Linares, T.A. Ezquerro, J.C. Canalda.**

Número de solicitud: P201031143.

Fecha: 23 de julio de 2010.

Otras actividades / Other activities

Tiberio Ezquerro Sanz. Short stays:

- Participation as member for the CSIC, European Science Foundation MO Forum: Medium-Sized Research Infrastructures, Strasbourg, France, 10-12th of January 2010
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- Inauguración del Sincrotrón Español ALBA, Barcelona, 22-23rd of March 2010.
- Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France). 14-16th of April 2010.
- Review Panel Committee, HASYLAB (participation as member of the Committee), Hamburg, Germany, 20-23rd of April 2010.
- CNRS, Mulhouse, France. Presidente tribunal de tesis doctoral “Morphology and thermal behaviour of single crystals of PS-b-PEO block copolymers”, 25th and 26th of April 2010.
- Review Panel Committee, HASYLAB (participation as member of the Committee), Hamburg, Germany, 14-15th of October 2010.
- Scientific Council Meeting, Institute Laue-Langevin, Grenoble (France). 20-22nd of October 2010.
- Review Panel Committee, SOLEIL French Synchrotron (participation as member of the Committee), Paris (France), 14-16th of November 2010.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 10-13th of December 2010.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana. Short stay:

- Laboratorio Nacional de Tecnología (LANOTEC), San José, Costa Rica, 22nd and 23rd of July 2010.

Aurora Nogales Ruiz. Short stays:

- 239th National Meeting of the American Chemical Society (ACS), San Francisco (USA), 20-27th of March 2010.
- 6th International ECNP, Conference on Nanostructured Polymers and Nanocomposites, Madrid (Spain), 28-30th of April 2010.
- Miembro de un tribunal de oposición a Científicos Titulares, Barcelona, 22-29th of November 2010.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 8-13th of December 2010.

Daniel R. Rueda Bravo. Short stays:

- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.

Fernando Ania García. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 24-29th of October 2010.

Araceli Flores Aguilar-Amat. Short stay:

- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 24-29th of October 2010.

Mari Cruz García-Gutiérrez. Short stays:

- Participation as Spanish representative at the 1st Meeting of the “European Synchrotron User Organization” (ESUO), Lisboa (Portugal), 17-18th of January 2010.
- Participation as CSIC Expert, 11th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 25th of January 2010
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 28th of February-2nd of March 2010.
- Participation as CSIC Expert, 12th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 19th of March 2010.
- Inauguración del Sincrotrón Español ALBA, Barcelona, 22nd of March 2010.
- Visita a la Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica, Barcelona, 23rd of March 2010.
- Participation as CSIC Expert, 13th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 2nd of July 2010.
- Participation as CSIC Expert, 14th Meeting of the Research Infrastructures Programme Committee of the FP7 specific programme Capacities, Brussels, Belgium, 22nd of October 2010.

Juan Francisco Vega Borrego. Short stays:

- ICPC Short Course 2010 Edition, Shanghai (China), 7th of November 2010.

Alejandro Sanz Parras. Short stays:

- Curso JCNS School on Data Analysis for Quasielastic Neutron Scattering with FRIDA, Laboratorio FRMII, Garching, Munich, Germany, 27-30th of April 2010.

- Asistencia a ‘School on Data Analysis with FRIDA’, Garching, Germany 28-29th of April 2010
- Visita al Imperial College de Londres, Londres, United Kingdom, 25-29th of November 2010.
- European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble, France, 8-13th of December 2010.

Francisco J. Baltá Calleja. Short stays:

- Round Table Discussions, Alexander von Humboldt Foundation, Bonn, Germany, 27th of May 2010.
- Annual Meeting 2010 Alexander von Humboldt Foundation, Berlin (Germany), 21-23rd of June 2010.
- Synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 3-8th of July 2010.
- Synchrotron DESY/HASYLAB, Hamburg, Germany, 25-29th of October 2010.
- Workshop: Standard Data Formats for Experiments with Photons, Neutrons, and Ions, Hamburg, Germany, 27-29th of October 2010.

Jaime J. Hernández Rueda. Short stays:

- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.

Ignacio Martín-Fabiani Carrato. Short stays:

- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 15-19th of March 2010.
- DESY/HASYLAB, Experimentación en la línea BW4, Hamburg, Germany, 16-20th of November 2010.

CAPÍTULO 6
PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN
CIENTÍFICA

CHAPTER 6
PUBLICATIONS AND SCIENTIFIC
PRODUCTION

1. R. Adhikari, S.K. Khatri, S. Adhikari, G.H. Michler, F.J. Baltá Calleja. *Microindentation hardness of nanostructured thermoplastic materials.* *Macromolecular Symposia* **290**, 166-174 (2010).
2. J.M. Andreu, C. Schaffner-Barbero, S. Huecas, D. Alonso, M.L. Lopez-Rodriguez, L.B. Ruiz-Avila, R. Núñez-Ramírez, O. Llorca and A.J. Martín-Galiano. *The antibacterial cell division inhibitor PC190723 is an FtsZ polymer-stabilizing agent that induces filament assembly and condensation* *Journal of Biological Chemistry* **285**, 14239-14246 (2010).
3. F. Ania, F.J. Baltá Calleja, S. Henning, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer. *Study of the multilayered nanostructure and thermal stability of PMMA/PS amorphous films.* *Polymer* **51**, 1805-1811 (2010).
4. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, A. Bartolotta, G. Di Marco, L. Garrido, D. Benachour, F.J. Baltá Calleja. *On polyethylene chain generation through chemical crosslinking of isotactic polypropylene.* *Journal of Applied Polymer Science* **116**(1), 394-403 (2010).
5. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, D. Benachour, B. Djellouli, L. Rong, B.S. Hsiao, F.J. Baltá Calleja. *SAXS study of reversibly crosslinked isotactic polypropylene/clay nanocomposites.* *Journal of Applied Polymer Science* **117**, 3262-3270 (2010).
6. S. Bouhelal, M.E. Cagiao, S. Khellaf, H. Tabet, D. Benachour, F.J. Baltá Calleja. *Nanostructure and micromechanical properties of reversibly crosslinked isotactic polypropylene/clay composites.* *Journal of Applied Polymer Science* **115**(5), 2654-2662 (2010).
7. M.E. Cagiao, P. Buzin, H.R. Kricheldorf, S.S. Funari, F.J. Baltá Calleja. *Micromechanical behavior of biodegradable polyesters relating to nanostructure.* *Journal of Applied Polymer Science* **117**, 2591-2596 (2010)
8. J. Carretero-González, T.A. Ezquerra, A. Amnuaypornsrri, S. Toki, R. Verdejo, A. Sanz, J. Sakdapipanich, B.S. Hsiao and M.A. López-Manchado. *Molecular dynamics of natural rubber as revealed by dielectric spectroscopy: The role of natural cross-linking.* *Soft Matter* **6**(15), 3636-3642 (2010).
9. I. Cuesta, R. Núñez-Ramírez, S.H.W Scheres, D. Gai, X.S. Chen, E. Fanning, J.M. Carazo. *Conformational rearrangements of SV40 large T antigen during early replication events.* *Journal of Molecular Biology* **397**, 1276-1286 (2010).
10. A. Flores, C. Arribas, F. Fauth, D. Khariwala, A. Hiltner, E. Baer, F.J. Baltá Calleja, F. Ania. *Finite size effects in multilayered polymer systems: development of PET lamellae under physical confinement.* *Polymer* **51**(20), 4530-4539 (2010).
11. M.C. García-Gutiérrez, A. Linares, J.J. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra, P. Poza and R.J. Davies. *Confinement-Induced One-Dimensional Ferroelectric Polymer Arrays.* *Nano Letters* **10**(4), 1472-1476 (2010).
12. T. Gómez del Río, P. Poza, J. Rodríguez, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández and T.A. Ezquerra. *Influence of single walled carbon nanotubes on the effective elastic constants of poly(ethylene terephthalate).* *Composites Science and Technology* **70**(2) 284-290 (2010).
13. L. González-García, A. Barranco, A. Muñoz Páez, A.R. González-Elipe, M.C. García-Gutiérrez, J.J. Hernández, D.R. Rueda, T.A. Ezquerra and D. Babonneau. *Structure of Glancing Incidence Deposited TiO₂ Thin Films as Revealed by Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering.* *CHEMPHYSICHEM* **11**(10), 2205-2208, (2010).
14. A. Hellati, D. Benachour, M. E. Cagiao, S. Boufassa, F. J. Baltá Calleja.

- The role of a compatibilizer on the structure and micromechanical properties of recycled PET/polyolefin blends with clay.*
Journal of Applied Polymer Science **118**, 1278–1287 (2010).
15. J.J. Hernández, D.R. Rueda, M.C. Garcia-Gutierrez, A. Nogales, T.A. Ezquerra, M. Soccio, N. Lotti and A. Munari.
Structure and morphology of thin films of linear aliphatic polyesters prepared by spin-coating.
Langmuir **26**(13), 10731–10737 (2010).
 16. M. Hernández, J. Carretero-González, R. Verdejo, T.A. Ezquerra and M.A. López-Manchado.
Molecular Dynamics of Natural Rubber/Layered Silicate Nanocomposites As Studied by Dielectric Relaxation Spectroscopy.
Macromolecules **43**(2) 643-651 (2010).
 17. R. Hernández, J. Sacristán, A. Nogales, M. Fernández, T.A. Ezquerra and C. Mijangos.
Structure and viscoelastic properties of hybrid ferrogels with iron oxide nanoparticles synthesized in situ.
Soft Matter **6**(16), 3910-3917 (2010).
 18. A. Linares, A. Nogales, A. Sanz, T.A. Ezquerra, M. Pieruccini.
Restricted dynamics in oriented semicrystalline polymers: Poly(vinylidene fluoride).
Physical Review E **82**(3) Art. no. 031802 (2010).
 19. M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, A. Martín-Molina, E. Aicart, E. Junquera.
Effect of Lipid Composition on the Structure and Theoretical Phase Diagrams of DC-Chol/DOPE-DNA Lipoplexes.
Biomacromolecules **11** (12), 3332–3340 (2010).
 20. C. Navio, M.J. Capitán, J. Alvarez, R. Miranda, F. Yndurain.
Formation of a non-magnetic metallic iron nitride layer on bcc Fe(100)
New Journal of Physics **12**, 073004 (2010).
 21. M.D. Ninago, A.J. Satti, A.E. Ciolino, E.M. Vallés, M.A. Villar, D.A. Vega, A. Sanz, A. Nogales and D.R. Rueda.
Synthesis and Morphology of Model PS-b-PDMS Copolymers.
Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry **48**(14), 3119-3127 (2010).
 22. A. Nogales, C. García, J. Pérez, P. Callow, T.A. Ezquerra and J. González-Rodríguez.
Three-dimensional model of human platelet integrin [α IIb β 3] in solution obtained by small angle neutron scattering (SANS).
Journal of Biological Chemistry **285**, 1023-1031 (2010).
 23. M. Pieruccini and A. Flores.
The influence of crystal formation on segmental mobility in polymers: hints from a statistical mechanical relaxation model”.
Colloid and Polymer Science **288**, 365-376 (2010).
 24. J. Ramos, V.L. Cruz, J. Martínez-Salazar, M. Brasse, P. Palma and J. Campora.
Density functional study for the polymerization of ethylene monomer using a new nickel catalyst.
Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry **48**, 1160-1165 (2010).
 25. D.R. Rueda, J.J. Hernández, M.C. García-Gutiérrez, T.A. Ezquerra, M. Soccio, N. Lotti, A. Munari, J. Perlich, R. Serna.
Flat-On Lamellae in Spin-Coated, Stable Films of Poly(propylene azelate).
Langmuir, **26**, 17540 (2010).
 26. A. Sanz, A. Nogales and T.A. Ezquerra.
Influence of fragility on polymer cold crystallization.
Macromolecules **43**(1) 29-32 (2010).
 27. A. Sanz, T. A. Ezquerra and A. Nogales.

- Interplay between amorphous and crystalline domains in semicrystalline polymers by simultaneous SAXS, WAXS and Dielectric Spectroscopy.*
IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 14 012011(2010).
28. A. Sanz A, Nogales A, Ezquerra T, Soccio M, Munari A, Lotti N.
Cold Crystallization of Poly(trimethylene terephthalate) as revealed by simultaneous WAXS, SAXS and Dielectric Spectroscopy.
Macromolecules **43**(2) 671-679 (2010).
29. R.D. Simoes, M.A. Rodriguez-Perez, J.A. De Saja, C.J.L. Constantino.
Thermomechanical characterization of PVDF and P(VDF-TrFE) blends containing corn starch and natural rubber.
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry **99**, 621-629 (2010).
30. H.C. Wong, A. Sanz, J.F. Douglas and J.T. Cabral.
Glass formation and stability of polystyrene-fullerene nanocomposites.
Journal of Molecular Liquids **153**, 79-87 (2010).
31. T.D. Ziebarth, R. Gonzalez-Soltero, M.M. Makowska-Grzyska, R. Nuñez-Ramírez, J.-M. Carazo and L.S. Kaguni.
Dynamic effects of cofactors and DNA on the oligomeric state of human mitochondrial DNA helicase.
Journal of Biological Chemistry **285**, 14639-14647 (2010).

6.3 TESIS DOCTORALES / Ph. D. THESES

Title: Control de la Nanoestructura como procedimiento para optimizar las propiedades físicas de materiales compuestos de matriz polimérica y nanotubos de carbono.

University: Universidad Autónoma de Madrid

Date: 9th of April 2010.

Mark: Sobresaliente “cum laude”.

Candidate: Jaime Javier Hernández Rueda.

Supervisor: Mari Cruz García-Gutiérrez and Tiberio A. Ezquerra Sanz.

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

Title: Simulación del proceso de cristalización de diferentes copolímeros de etileno en disolución diluidas.

University: Universidad Politécnica de Madrid.

Date: 22th of September 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Sara Sanmartín Sánchez.

Supervisor: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Javier Ramos Díaz.

Title: Caracterización de materiales compuestos de polipropileno y fibras de celulosa por medio de técnicas de indentación. (Proyecto Fin de Carrera)

University: Escuela universitaria de Ingeniería Técnica Industrial, Universidad Politécnica de Madrid.

Date: 15 October 2010.

Mark: Sobresaliente.

Candidate: Fátima Montero Sánchez.

Supervisor: Fernando Ania García

