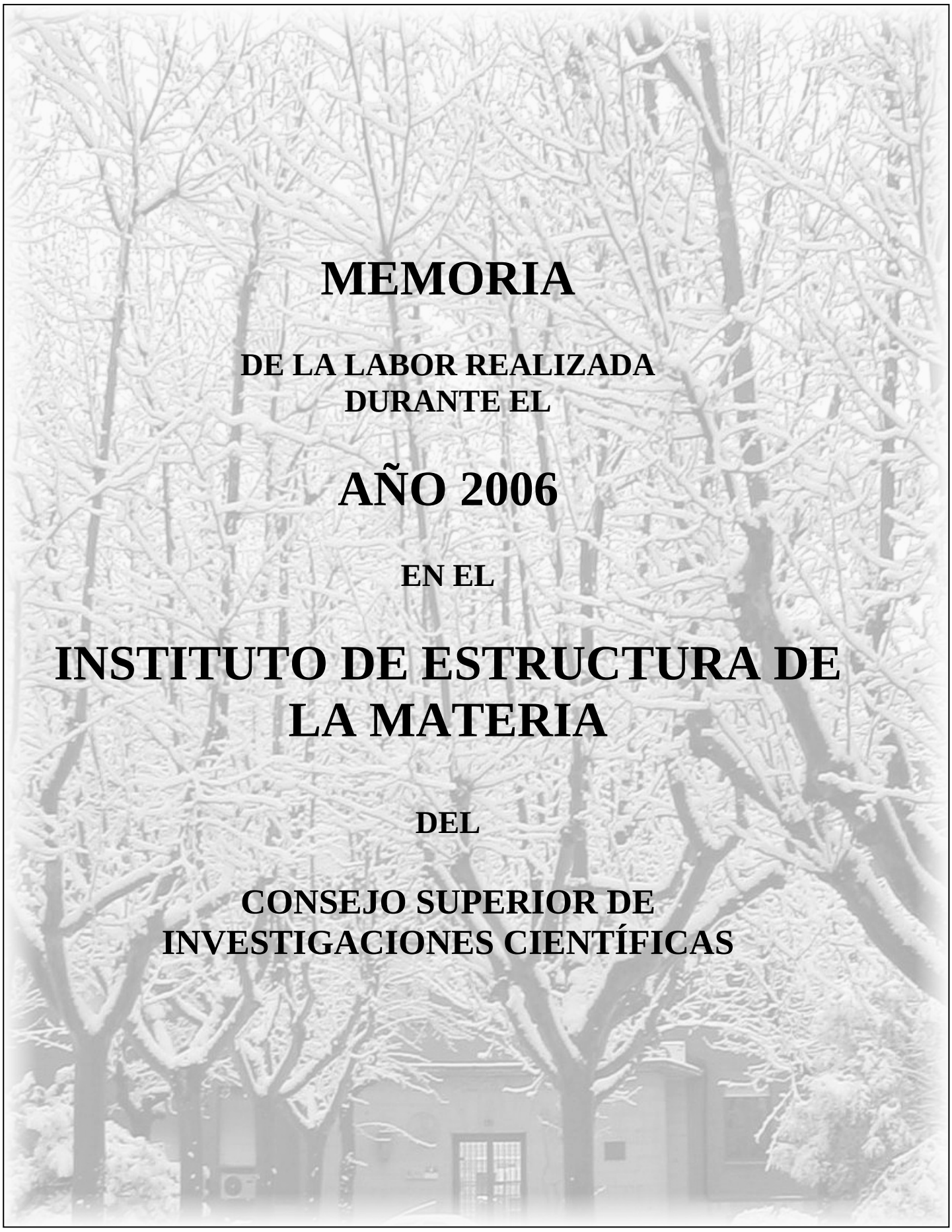

MEMORIA

DE LA LABOR REALIZADA
DURANTE EL

AÑO 2006

EN EL

INSTITUTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA

DEL

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

CAPÍTULO 1

ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

DEPARTAMENTOS DE INVESTIGACIÓN

DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Jefe del Departamento:

Dr. Tiberio A. Ezquerra Sanz	Investigador Científico

Personal Científico:

Nombre y Apellidos:	Escala o Categoría:
Prof. Francisco José Baltá Calleja	Profesor de Investigación
Prof. Javier Martínez de Salazar Bascuñana	Profesor de Investigación
Dr. Daniel R. Rueda Bravo	Investigador Científico
Dr. Fernando Ania García	Científico Titular
Dra. María Esperanza Cagiao Escohotado	Científico Titular
Dra. María José Capitán Aranda	Científico Titular
Dr. Victor Cruz Cañas	Científico Titular
Dra. Araceli Flores Aguilar-Amat	Científico Titular
Dra. Amelia Linares Dos Santos	Científico Titular
Dra. Mª Cruz García Gutiérrez	Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Dra. Aurora Nogales Ruiz	Investigador Contratado (Ramón y Cajal)
Dr. Juan Francisco Vega Borrego	Investigador Contratado (Ramón y Cajal)- Dr.Vinculado
Dra. Mª Teresa Expósito Espinosa	Becario Predoctoral FPI
D. Jaime Javier Hernández Rueda	Becario Predoctoral FPI
Dra. Sonia Martínez Hedo	Becario Predoctoral FPU
Dña. Nuria Robledo Álvaro	Becario Predoctoral con cargo a Proyecto
D. Jon Otegui de la Fuente	Becario Postgrado I3P

Personal de apoyo:

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

CAPÍTULO 2

LABOR INVESTIGADORA

2.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

SUBLÍNEAS DE INVESTIGACIÓN:

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

TÉCNICAS UTILIZADAS:

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

LABOR INVESTIGADORA

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

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

características nanoestructurales (dimensiones y energía libre de superficie de las laminillas) de este tipo de materiales.

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

- Procesos de microindentación en materiales poliméricos compuestos.

En colaboración con el Dr. Broza de la Universidad de Hamburg-Harburg se ha estudiado la influencia que la adición de pequeñas cantidades de nanotubos de carbono, de pared única o de pared múltiple, ejerce en las propiedades mecánicas de una matriz polimérica como es el politereftalato de butileno (PBT). Las variaciones encontradas se han discutido de acuerdo a la forma en que se transfieren los esfuerzos entre la matriz y los nanotubos, al grado de dispersión de estos últimos y a su naturaleza.

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

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

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

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

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

En colaboración con el Dr. S. Bouhelal, de la Universidad de Sétif (Argelia), se han caracterizado muestras de polipropileno isotáctico entrecruzado de forma reversible por vía química. La caracterización de los

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

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

En colaboración con el grupo de la Profa. J. Kornfield, del Instituto Tecnológico de California (Caltech) se han efectuado estudios simultáneos de difracción de rayos X a ángulos grandes y pequeños y de difracción de luz en la línea BM26b del ESRF en Grenoble. El origen de los enormes efectos, que el flujo del material en estado fundido produce sobre el proceso de cristalización inmediatamente posterior, parece residir en la aparición de ciertos estados orientados precursores. La creación de estos estados depende tanto de las propiedades del material como del esfuerzo aplicado. La sensibilidad del sistema reo-óptico ha permitido la detección de esos precursores pese a estar enormemente dispersos en el momento de ser inducidos por el flujo del material fundido y cuando todavía son invisibles para las técnicas de rayos X. Posteriormente, con el inicio de la cristalización éstas últimas técnicas han permitido cuantificar de forma detallada las características y la cinética de crecimiento de los microcristales que inician su nucleación a partir de los precursores.

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

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

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

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

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

La motivación del presente trabajo surge a partir de la observación experimental realizada en los laboratorios de Repsol referente al descenso en el peso molecular del polímero obtenido con substituyentes propilo o superiores en posición 3 del ligando aromático. Se han calculado perfiles de energía potencial para los procesos de inserción, propagación de cadena y las reacciones de terminación más probables como β-transferencia al monómero y β-eliminación. Se han contemplado los dos casos frontera en el comportamiento diferencial, los zirconocenos con substituyentes etilo versus propilo. La gran semejanza de los perfiles obtenidos con ambos catalizadores motivó la inclusión de nuevos elementos en los modelos tales como presencia del comonómero 1-hexeno y cocatalizador. Los resultados obtenidos en dichas simulaciones sobre estos nuevos sistemas más complejos revelan nuevamente el gran parecido en el comportamiento catalítico de ambos complejos y dirigen la tarea investigadora a la incorporación de

nuevos elementos no tenidos en cuenta hasta la fecha tales como el soporte silíceo o algún otro modelo del cocatalizador metilaluminoxano (MAO) mas apropiado, proceso en el que se viene trabajando actualmente.

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

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

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

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

- Síntesis de nuevas poliolefinas funcionalizadas con arquitectura controlada.

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

- Estudio viscoelástico de modelos moleculares y mezclas: procesabilidad.

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

Por otro lado, se ha continuado con el estudio de las mezclas de modelos moleculares con diferentes materiales poliméricos (copolímeros EVA y UHMWPE) a la luz de distinto modelos físicos constitutivos aplicados a diferentes escalas. Por un lado, se han estudiado las propiedades viscoelásticas a la luz de modelos que asumen interacción segmental (miscibilidad) entre las especies moleculares, o ascendiendo un

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

- Simulación numérica del procesado de poliolefinas.

Se ha dado un paso más para entender el comportamiento de los materiales poliméricos durante el procesado, a través de la aplicación de herramientas computacionales. Se han aplicado ecuaciones fenomenológicas constitutivas que describen la relación entre el esfuerzo y la deformación al problema del flujo de polímeros a través de boquillas circulares, mediante la definición de la geometría a través de elementos finitos. Se ha comprobado que los detalles que definen la arquitectura molecular (colas de alto peso molecular) y que afectan a las propiedades reológicas básicas (viscosidad, tiempo de relajación), modulan el flujo de los materiales sometidos a las mismas condiciones de proceso, y afectan enormemente a los fenómenos post-extrusión, como el hinchamiento tras la salida de la boquilla. Estas herramientas de cálculo asistido por ordenador han demostrado además ser muy útiles para el entendimiento de fenómenos en flujos más complejos, tales como aquéllos que se producen en las extrusoras de doble husillo.

- Viscoelasticidad y procesos de cristalización.

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

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

Ya se apuntaron en la memoria correspondiente al año 2005 los excelentes resultados obtenidos con un nuevo catalizador de centro activo único (sintetizado por el grupo del Prof. Antonio García, del Departamento de Química Orgánica I en la Facultad de Química de la UCM). Este sistema, además de generar actividades 10 veces superiores a otros catalizadores disponibles comercialmente (catalizadores de geometría constreñida o CGC), da lugar a materiales con un elevadísimo peso molecular, de gran interés en aplicaciones donde se requiere elevada resistencia mecánica y a la fricción. Además, los copolímeros presentan una gran homogeneidad química (evaluada mediante CRYSTAF) que los diferencia claramente de los materiales obtenidos hasta el momento mediante el uso de catalizadores comerciales CGC. Se ha realizado un estudio exhaustivo de las características estructurales y las propiedades mecánicas en función de la temperatura y del contenido de comonómero en estos materiales de etileno/estireno. La cristalinidad se ha evaluado mediante rayos X, densidad, espectroscopía Raman y entalpía de fusión. Los resultados de

tracción y de los experimentos dinamo-mecánicos han permitido arrojar nueva luz sobre las transiciones mecánicas de la familia de los polietilenos. De especial relevancia son los referentes a la transición vítrea, que se ve muy alterada por la presencia de las ramificaciones, así como por la naturaleza química de dichas ramificaciones. Se observan claras diferencias entre los copolímeros etileno/estireno y los copolímeros alifáticos estudiados en el grupo con anterioridad. Se ha comprobado que la presencia del comonómero afecta no sólo a los valores del módulo elástico sino también a la movilidad molecular de la fase amorfa. Sin embargo, mientras que el módulo elástico (por debajo del límite de la deformación no recuperable) solo se ve afectado por la cristalinidad, el esfuerzo en la zona de fluencia se ve enormemente afectado por la estructura química (movilidad de la fase amorfa). Los copolímeros de etileno/estireno exhiben un marcado comportamiento de endurecimiento por deformación ("strain-hardening"), como consecuencia de la mayor fricción local (a nivel molecular) aportada por la presencia de las rígidas unidades de estireno. Este comportamiento los diferencia claramente de los materiales con base alifática.

También se ha llevado a cabo el estudio preliminar de la estructura y las propiedades térmicas de los copolímeros funcionalizados con alcoholes superiores, mediante CRYSTAF y calorimetría diferencial de barrido. El aumento en el contenido en comonómero reduce la cristalinidad y la temperatura de fusión. El espesor de las laminillas cristalinas se ve significativamente afectado por la presencia de unidades hidroxílicas en la cadena polimérica. Los materiales exhiben un amplio espectro de propiedades, en función de la cantidad de comonómero.

- Simulación de propiedades de poliolefinas.

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

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

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

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

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

- Interrelación estructura-dinámica en materia condensada blanda polimérica.

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

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

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

En colaboración con científicos del Max-Planck Institut de Maguncia, Alemania, y mediante difracción de rayos X con técnicas de microfoco y microscopía de fuerzas atómicas (AFM) se ha caracterizado el desarrollo de estructuras organizadas en diferentes polímeros controladas por plantillas carbonáceas. La implicación de este fenómeno en la obtención de nanoestructuras poliméricas definidas está siendo explotada en otros sistemas basados en nanotubos de carbono de diferente naturaleza.

3. Nanocomposites poliméricos basados en nanotubos de carbono.

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

4. Dinámica molecular en sistemas amorfos.

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

5. Materiales poliméricos con propiedades avanzadas.

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

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

Durante el año 2006 hemos finalizado con éxito el diseño, construcción, puesta a punto y verificación experimental de un sistema para la realización de experimentos simultáneos de difracción de rayos X a

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

CAPÍTULO 3

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

3.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Nuevas poliolefinas basadas en copolímeros de etileno.
Código o Referencia: MAT2002-01242.
Entidad Financiadora: MCYT.
Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.
Periodo: marzo 2003-octubre 2006.
Objetivos: Polimerización de nuevas poliolefinas para el estudio de problemas básicos en la física de polímeros y diseño de nuevos materiales con arquitectura controlada.

Nanoestructura y optimización de propiedades micromecánicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares.
Código o Referencia: FIS2004-01331.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.
Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.
Objetivos: Estudio de la correlación entre la nanoestructura y las propiedades físicas de superficies poliméricas y materiales multilaminares.

Arquitectura electroquímica aplicada a la síntesis de materiales nanoestructurados con propiedades magnéticas singulares.
Código o Referencia: MAT2004-05865.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Mª José Capitán Aranda.
Periodo: diciembre 2004-diciembre 2007.
Objetivos: Explorar diversas vías de síntesis de nanoestructuras magnéticas en superficies prestando un especial interés al estudio de la correlación existente entre su nano-orden y las propiedades finales del material.

Interrelaciones estructura-propiedades de materiales poliméricos y "composites" poliméricos nanoestructurados en volumen y en superficie.
Código o Referencia: MAT2005-01768.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerra Sanz.
Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.
Objetivos: Comprensión de los fenómenos que permiten una nanoestructuración tanto en tres dimensiones (volumen) como en dos dimensiones (superficie) de materiales poliméricos semicristalinos y *nanocomposites* poliméricos.

Dinámica, compatibilidad molecular y nanoestructura de poliolefinas de nueva generación.
Código o Referencia: MAT2006-0400.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana.
Periodo: 2006-2009.
Objetivos: Incorporación de los avances recientes en polimerización al diseño de poliolefinas funcionalizadas, estructuras bimodales de alta resistencia al impacto y compatibilidad con otros polímeros con grupos polares.

Carbon Nanotubes for Future Industrial Composites: Theoretical Potential *versus* Immediate Application (CNT-NET).
Código o Referencia: G5RT-CT-2001-05026.
Entidad Financiadora: UE.
Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerra Sanz.
Periodo: 2002–2006.
Objetivos: Formación de una red europea para la investigación y desarrollo de materiales compuestos con nanotubos de carbono y matriz polimérica.

"Structuring Polymers" COST-P12.
Entidad Financiadora: UE.
Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerra Sanz y M. Gómez.

Periodo: 2003–2007.
Objetivos: Formación de una red europea para la investigación de la estructuración de polímeros sintéticos.

Construcción molecular mediante procesos catalizados por complejos organometálicos/Subproyecto GEMPPO: aplicación al enlace C-C en poliolefinas.
Código o Referencia: S-0505/PPQ/000328.
Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid.
Investigador Principal: Pascual Royo García/IP del IEM: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Víctor Cruz Cañas.
Periodo: 2006–2009.
Objetivos: El proyecto tiene como objetivo aunar la experiencia de grupos líderes en la CAM orientando el esfuerzo al desarrollo de nuevos catalizadores organometálicos en diferentes aplicaciones. Nuestro subproyecto se centra en nuevas poliolefinas soportadas en el que se simulan las reacciones de polimerización realizadas por otros grupos y las propiedades físicas de los materiales obtenidos.

Simultaneous Measurements of SAXS, WAXS and Dielectric Spectroscopy in Advanced Polymer Systems.
Código o Referencia: II-03-073EC.
Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).
Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerra Sanz.
Periodo: enero 2004-diciembre 2006.
Objetivos: Utilización de la radiación sincrotrón para la investigación de las relaciones entre la estructura y la dinámica en materiales poliméricos.

Resolving Kinetics of Early Structure Formation during Shear-Induced Crystallization of Polypropylene.
Código o Referencia: ME-1295.
Entidad Financiadora: UE/European Synchrotron Radiation Facility (ESRF).
Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.
Periodo: 2006-2007.
Objetivos: Estudio in situ de la cinética de los primeros estadios de cristalización del polipropileno bajo la acción de un mecanismo de cizalla.

Nanostructure Development in Polymer Systems: Influence of External Constraints.
Código o Referencia: II-04-029EC.
Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).
Investigador Principal: Francisco J. Baltá Calleja.
Periodo: 2004-2006.
Objetivos: Estudio de la cristalización de polímeros en sistemas confinados mediante métodos de difracción de rayos X.

Study of Self-Organized Systems on Surface.
Código o Referencia: II-03-071EC.
Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).
Investigador Principal: Mª José Capitán Aranda.
Periodo: enero 2004-diciembre 2006.
Objetivos: Estudio estructural mediante difracción de superficies con rayos X de sistemas auto-organizados.

Análisis de la relación estructura-actividad mediante descriptores mecano-cuánticos aplicado a la catálisis homogénea para polimerización de olefinas.
Código o Referencia: 2005CL0049.
Entidad Financiadora: Proyecto conjunto CSIC/Universidad Pontificia de Chile.
Investigador Principal: Víctor Cruz Cañas (España).
Periodo: 2006-2007.
Objetivos: Incorporación de metodologías emergentes de la teoría de funcionales de la densidad conceptual aplicadas al campo de la catálisis metalocénica de polímeros.

Multifunctional Polymeric Materials through Nanostructuring.
Código o Referencia: MERG-CT-2004-511908.
Entidad Financiadora: UE.
Investigador Principal: M.C. García Gutiérrez/Investigador Responsable en el IEM: Tiberio A. Ezquerra Sanz.
Periodo: enero 2005-enero 2006.

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

Fabricación y optimización de prototipos de pilas de combustible poliméricas (metanol o hidrógeno) basados en sellos elastoméricos y membranas híbridas de elevada conductividad protónica.
Código o Referencia: ENE2004-00081/ALT.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: J. L. Acosta/Investigador participante en el IEM: Amelia Linares Dos Santos.
Periodo: enero 2005-diciembre 2007.
Objetivos: Se trata de desarrollar nuevos materiales poliméricos que, presentando elevada conducción protónica, puedan actuar como membranas en pilas de combustible. Se investigará con polímeros de alta estabilidad térmica y sistemas híbridos. Como combustibles se pretende utilizar tanto el hidrogeno como el metanol directo.

Sistemas modelo biomiméticos de procesos en superficies.
Código o Referencia: MEC NAN2004-08881-C02-01.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
Investigador Principal: R. Miranda/Investigador participante en el IEM: Mª José Capitán Aranda.
Periodo: diciembre 2005-diciembre 2008.
Objetivos: Crecimiento y caracterización de sistemas nanoestructurados inspirados en modelos biológicos.

Nanoestructuras magnéticas: fabricación, propiedades y aplicaciones biomédicas y tecnológicas.
Entidad Financiadora: Comunidad Madrid.
Investigador Principal: R. Miranda/Investigador participante en el IEM: Mª José Capitán Aranda.
Periodo: diciembre 2005-diciembre 2009.
Objetivos: Exploración de diversas vías para la síntesis de nanoestructuras magnéticas y estudio de las aplicaciones biomédicas y tecnológicas de las mismas.

Phase Behaviour of Aqueous Dispersions of Mixtures of Ceramide, Cholesterol and Protonated Fatty Acid.
Código o Referencia: I-05-009EC.
Entidad Financiadora: UE/Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY).
Investigador Principal: E. Melo/Investigador participante en el IEM: Mª José Capitán Aranda.
Periodo: enero 2005-enero 2006.
Objetivos: Estudio mediante difracción de rayos X de la estructura de membranas proteínicas modelos.

PROYECTOS CON LA INDUSTRIA

Incremento de las prestaciones de prototipos mediante la elaboración de materiales termoplásticos cargados con nanofibras de carbono. GANF para el ajuste de la resistividad eléctrica.
Código o Referencia: II (EU 3433-APOLYNAIRE)
Empresa: Grupo Antolín–Ingeniería, S.A.
Investigador Principal: Tiberio A. Ezquerra Sanz.
Periodo: enero 2006-diciembre 2006.
Objetivos: Investigación de las propiedades dieléctricas y conductoras de una serie de materiales compuestos poliméricos de nanofibras de carbono con diferentes matrices poliméricas: poliamida 12, poliamida 6, poliamida 66, polipropileno y polietileno.

Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins.
Empresa: DOW Chemicals.
Investigador Principal: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y Juan F. Vega Borrego.
Periodo: marzo 2006-marzo 2007.
Objetivos: Determinar la influencia de la distribución molecular en las respuestas elásticas de películas orientadas de cara a la optimización de las propiedades mecánicas y de transparencia óptica.

CAPÍTULO 4

COOPERACIÓN CIENTÍFICA

4.1 CONCRESOS Y REUNIONES NACIONALES

(Subrayado el nombre del ponente).

4.1.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

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

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

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

- Miembro del Comité, Francisco J. Baltá Calleja.

4.2 CONGRESOS Y REUNIONES INTERNACIONALES

(Subrayado el nombre del ponente).

4.2.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- *Croissances de couches minces de $CoFe_2O_4$ par epitaxie par jets moleculaires assistée par plasma d'oxygène* (Póster), Mª José Capitán Aranda.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- Asistencia, Tiberio A. Ezquerra Sanz.

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

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

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

- Asistencia, Franciso J. Baltá Calleja.

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

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

4.3. ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EN EL INSTITUTO

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

4.3.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

4.4 CONFERENCIAS DE INVESTIGADORES INVITADOS

4.4.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Dra. M. Soledad Gutiérrez Oliva.
Laboratorio de Química Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile.
Estudio teórico de reacciones químicas: uso de la TFD.
Fecha: 27 de septiembre de 2006.

Prof. Friedrich Kremer.
Universidad de Leipzig, Alemania.
Molecular Dynamics of Thin Polymer Films.
Fecha: 17 de noviembre de 2006.

D. Jorge Martínez Araya.
Laboratorio de Química Teórica Computacional (QTC), Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile, Chile.

Aplicación de la teoría del funcional de la densidad conceptual a la etapa de iniciación de polimerización de etileno catalizada por catión metil-bis(ciclopentadienil) de circonio IV.
Fecha: 27 de octubre de 2006.

Prof. Kia L. Ngai.
Naval Research Laboratory, Washington DC, E.E.U.U.
Are All Standard Theories and Models of Glass Transition Inadequate?
Fecha: 19 de junio de 2006.

Prof. Jürgen Rühe.
University of Freiburg, IMTEK, Friburgo, Alemania.
From Computer Hard Disks to DNA-Chips: Tailor-Made Surfaces for Microsystems Engineering.
Fecha: 8 de septiembre de 2006.

Prof. James Runt.
Dept. of Materials Science and Engineering, Pennsylvania State University, E.E.U.U.
Dynamics of Multicomponent Polymer Systems Using Broadband Dielectric Spectroscopy.
Fecha: 11 de septiembre de 2006.

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

4.5.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

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

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

Mª Cruz García Gutiérrez.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

Tiberio A. Ezquerra Sanz.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

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

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

Daniel R. Rueda Bravo.
- Hamburger Synchrotronstrahlungslabor, DESY, Hamburgo, Alemania, 28 de junio a 5 de julio de 2006.

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

CAPÍTULO 5

LABOR DOCENTE, DIFUSIÓN DE LA CIENCIA Y OTRAS ACTIVIDADES

5.1 ASIGNATURAS DE DOCTORADO IMPARTIDAS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2 CURSOS Y CONFERENCIAS IMPARTIDOS POR INVESTIGADORES DEL INSTITUTO

5.2.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja.

- *Micromechanical Properties of Confined Polymer Systems Using Synchrotron Radiation Techniques and Nanoindentation Methods*, Universidad de Cleveland (E.E.U.U.), 9 de marzo de 2006.
- *Micromechanical Properties of Confined Polymer Systems Using Synchrotron Radiation Techniques and Nanoindentation Methods*, Universidad de Akron (E.E.U.U.), 10 de marzo de 2006.
- *Advances in Microhardness-Nanostructure Correlations: Polymer Materials and Composites*, Universidad Stony Brook, Nueva York (E.E.U.U.), 17 de marzo de 2006.
- *Nanostructure Development in Confined Polymer Systems Using Synchrotron X-Ray Diffraction Techniques and Nanoindentation Methods*, Kyoto University Uji, Kyoto (Japón), 30 de junio de 2006.
- *Nanostructure Development in Confined Polymer Systems Using Synchrotron X-Ray Diffraction Techniques and Nanoindentation Methods*, Tokyo Institute of Technology, Tokyo (Japón), 7 de julio de 2006.
- *Micromechanical Properties of Polymer Materials and Composites Relating to Nanostructure and Morphology*, Fraunhofer-Institute for Applied Polymer Research, Berlín (Alemania), 18 de julio de 2006.
- *Nanostruktur und mikromechanische messungen an Polymerwekstoffen und Kompositen*, Universidad de Kassel (Alemania), 19 de diciembre de 2006.

Víctor Cruz Cañas.

- *Modelización de sistemas catalíticos basados en catalizadores fenoxo-imino para la obtención de poliolefinas de muy alto peso molecular y poliolefinas funcionalizadas*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 1 de febrero de 2006.
- *Estudios QSAR sobre catalizadores zirconoceno con puente silano*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 19 de septiembre de 2006.
- *Aplicación de la metodología 3D-QSAR en el estudio de la reactividad de catalizadores metalocénicos*, Universidad Pontificia de Chile, Santiago de Chile (Chile), diciembre de 2006.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *La luz sincrotrón: estructura y propiedades de sistemas poliméricos desde lo nano a lo macro*, Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología, Universidad Rey Juan Carlos, Madrid, marzo de 2006.

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

- *Probing Ordering Processes in Soft Condensed Matter by Means of Time Resolved Methods*, Sincrotrón español ALBA, Barcelona, 14 y 15 de marzo de 2006.
- *Dispersión de Rayos X aplicada al análisis morfológico de nanotubos de carbono, polímeros y sus composites*, Curso de especialización de Postgrado "Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas", CSIC, Jaca (Huesca), 19 a 23 de junio de 2006.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- *Caracterización molecular y estructural de poliolefinas de UHMWPE y funcionalizadas*, Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 19 de septiembre de 2006.
- *On the Effect of UHMW PE in the Processability of Polyethylenes*, Universidad Tecnológica de Eindhoven (Holanda), 26 de octubre de 2006.
- *Estudio de la transición vítrea del polietileno con grupos butilo y fenilo en la cadena lateral*, Universidad Nacional Autónoma de México (México), 17 de noviembre de 2006.

Juan Francisco Vega Borrego.

- *Introducción a la reometría capilar y sus aplicaciones*, Seminario CEAST, IZASA S.A., Centro Catalán del Plástico, Barcelona, octubre de 2006.

5.3 CURSOS, CONGRESOS Y SEMINARIOS ORGANIZADOS POR EL INSTITUTO

5.3.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Victor Cruz Cañas.

- *Supercomputación: cómo hacer química sin laboratorios,* seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 7 de abril de 2006.

Mari Cruz García Gutiérrez.

- *La luz sincrotrón como herramienta para el estudio de procesos estructurales y dinámicos en polímeros*, seminario dentro del III Curso de Iniciación a la Investigación en Estructura de la Materia, 7 de abril de 2006.

Aurora Nogales Ruiz.

- *La radiación sincrotrón: Ayer, hoy y mañana de la Física de Polímeros*. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, 28 de febrero de 2006.

Tiberio A. Ezquerra Sanz y Araceli Flores Aguilar-Amat (Comité Organizador).

- International Polymer Physics Meeting to Honour Prof. F. J. Baltá Calleja on his 70th Birthday: *Advances in Nanostructure and Physical Properties of Polymer Materials and Nanocomposites*, Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, 23 y 24 de octubre de 2006.

J. Martínez de Salazar Bascuñana y Juan F Vega Borrego (Organizadores).

- *Introducción a la reometría capilar y sus aplicaciones*, Seminario CEAST, IZASA S.A. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, julio de 2006.

5.4 PREMIOS Y OTROS MÉRITOS

5.4.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Francisco J. Baltá Calleja.

- Consejero de la Sociedad de Estudios Internacionales (SEI), España, 7 de abril de 2006.

Tiberio A. Ezquerra Sanz.

- Miembro del *Scientific Advisory Committee* (SAC) del Sincrotrón SOLEIL, Francia, diciembre de 2005-diciembre de 2007.
- Miembro del *Review Panel Committee* del HASYLAB, DESY, Hamburgo, Alemania, octubre de 2006-octubre de 2008.

Javier Martínez de Salazar Bascuñana.

- Miembro del Comité *Executive Board of the European Polymer Federation*, European Science Foundation, desde marzo de 1996.
- Miembro del Consejo Rector del CSIC, Ministerio de Educación y Ciencia, desde marzo de 1999 hasta la fecha.

5.5 TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

5.5.6 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Estancias de investigadores del instituto en empresas

Mª Teresa Expósito Espinosa
Lugar: Repsol-YPF.
Fechas: mayo a diciembre de 2006.
Finalidad: trabajo sobre síntesis de polietilenos funcionalizados.

Conferencias de transferencia tecnológica impartidas u organizadas por el Instituto

Ponente: Víctor Cruz Cañas.
Título: *Efecto del co-catalizador MAO en la síntesis de poliolefinas con catalizadores de centro activo único.*
Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: Javier Matínez-Salazar Bascuñana.
Título: *Arquitectura molecular y estructura de polietilenos obtenidos mediante síntesis dua*l.
Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: J. Sancho.
Título: *Efecto del sustituyente en el ligando del catalizador de centro activo único en las características moleculares de poliolefinas.*
Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.
Título: *Reología de polietilenos obtenidos mediante síntesis dual.*
Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 22 de marzo de 2006.

Ponente: Javier Matínez-Salazar Bascuñana.
Título: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Structure and Orientation by X-Ray Diffraction.*
Colaboración: **IEM/Dow Chemicals.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Nuria Robledo Álvaro.
Título: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins*: *Preliminary Results of Pure Components.*
Colaboración: **IEM/Dow Chemicals.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Juan Francisco Vega Borrego.
Título: *Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Literature Results on LLDPE/LDPE Blends.*
Colaboración: **IEM/Dow Chemicals.**
Lugar: Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.

Fecha: 8 de julio de 2006.

Ponente: Jon Otegui de la Fuente.
Título: *Polietilenos obtenidos mediante síntesis dual: estado del arte.*
Colaboración: **IEM/Repsol-YPF.**
Lugar: Centro Tecnológico de Repsol-YPF (Móstoles).
Fecha: 4 de diciembre de 2006.

Informes de transferencia tecnológica

Juan Francisco Vega Borrego, Mª Teresa Expósito Espinosa, Jon Otegui de la Fuente y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Polyethylenes from Dual Catalysis.
Repsol-YPF (mayo, 2006).

Nuria Robledo Álvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Preliminary Results of Pure Components.
Dow Chemicals (junio, 2006).

Nuria Robledo Álvaro, Juan Francisco Vega Borrego y Javier Martínez-Salazar Bascuñana.
Study of the Relationships between Solid State Morphology and Melt State Properties of Blends of Linear Low Density Polyethylene and Other Polyolefins: Melt Rheology and Mechanical Properties.
Dow Chemicals (noviembre, 2006).

CAPÍTULO 6

PUBLICACIONES Y PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

6.1 TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS

6.1.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

1. F. Ania, G. Broza, M. F. Mina, K. Schulte, Z. Roslaniec y F. J. Baltá Calleja.
Micromechanical Properties of Poly(Butylene Terephthalate) Nanocomposites with Single- and Multi-Walled Carbon Nanotubes.
Composite Interfaces **13**, 33-45 (2006).

2. R. K. Bayer, M. E. Cagiao y F. J. Baltá Calleja.
Structure Development in Amorphous Starch as Revealed by X-Ray Scattering: Influence of the Network Structure and Water Content.
Journal of Applied Polymer Science **99**, 1880-1886 (2006).

3. I. Puente Orench, F. J. Baltá Calleja, P. J. Hine y I. M. Ward.
A Microindentation Study of Polyethylene Composites Produced by Hot Compaction.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 1659-1663 (2006).

4. M. Rittner, P. Baeuerle, H. Schweizer, F .J. Baltá Calleja y M. H. Pilkuhn.
Oligothiophene Field Effect Transitors of DDnT and DPnT Type: Morphology, Performance in Vacuum and in Air.
Synthetic Metals **156**, 21-26 (2006).

5. R. K Bayer y F. J. Baltá Calleja.
Nanostructure Development in Wet Amorphous Amylopectin as Revealed by in Situ X-Ray Scattering Methods.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 3832-3839 (2006).

6. A. Ueberschaer, M. E. Cagiao, R. K. Bayer, S. Henning y F. J. Baltá Calleja.
Micromechanical Properties of Injection Molded Starch/Wood-Particle Composites.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 4893-4899 (2006).

7. R. Adhikari, W.Lebek, R. Godehardt, G. H. Michler, M. E. Cagiao, F. J. Baltá Calleja y K. Knoll.
Relationship between Nanostructure and Deformation Behaviour of Microphase-separated Styrene/Butadiene Systems.
Journal of Applied Polymer Science **101**, 998-1006 (2006).

8. A. Flores, V. B. F. Mathot, G. H. Michler, R. Adhikari y F. J. Baltá Calleja.
Novel Aspects of Microindentation Hardness in Very Low Crystallinity Ethylene-1-Octene Copolymers: A Model for Deformation.
Polymer **47**, 5602-5609 (2006).

9. M. Boyanova, F. J. Baltá Calleja y S. Fakirov.
New Aspects of the β - α Polymorphic Transition in Plastically Deformed Isotactic Polypropylene Studied by Microindentation Hardness.
Journal of Materials Science **41**, 5504-5509 (2006).

10. D. R. Rueda, M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, M. J. Capitán, T. A. Ezquerra, A. Labrador, E. Fraga, D. Beltrán, J. Juanhuix, J. F. Herranz y J. Bordas.
Versatile Wide Angle Diffraction Setup for Simultaneous Wide and Small Angle X-Ray Scattering Measurements with Synchrotron Radiation.
Review of Scientific Instruments **77**, 033904 (2006).

11. A. Gourrier, M. C. García Gutiérrez y C. Riekel.
Hardness Testing Under a Different Light: Combining Synchrotron X-Ray Microdiffraction and Indentation Techniques for Polymer Fiber Structure.
Philosophical Magazine **86**, 5753-5767 (2006).

12. M. Kastler, W. Pisula, F. Laquai, A. Kumar, R. J. Davies, S. Baluschev, M. C. García-Gutiérrez, D. Wasserfallen, H. J. Butt, C. Riekel, G. Wegner y K. Müllen.
Organisation of Charge-Carrier Pathways for Organic Electronics.
Advanced Materials **18**, 2255-2259 (2006).

13. J. J. Hernández, M. C .García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda y T. A. Ezquerra.
Small-Angle X-Ray Scattering of Single-Wall Carbon Nanotubes Dispersed in Molten Poly(Ethylene Terephthalate).
Composites Science and Technology **66**, 2629-2632 (2006).

14. W. Pisula, M. Kastler, D. Wasserfallen, R. J. Davies, M. C. García-Gutiérrez y K. Müllen.
From Macro- to Nanoscopic Templating with Nanographenes.
Journal of the American Chemical Society **128**, 14424-14425 (2006).

15. A. Sanz, A. Nogales, T. A. Ezquerra, N. Lotti, A. Munari y S. S. Funari.
Order and Segmental Mobility during Polymer Crystallization: Poly(Butylene Isophthalate).
Polymer **47**, 1281-1290 (2006).

16. M. G. Zolotukhin, M. C. G. Hernandez, A. M. Lopez, L. Fomina, G. Cedillo, A. Nogales, T. A. Ezquerra, D. R. Rueda, H. M. Colquhoun, K. M. Fromm, A. Ruiz-Trevino y M. Ree.
Film-Forming Polymers Containing in the Main-Chain Dibenzo Crown Ethers with Aliphatic (C_{10}-C_{16}), Aliphatic-Aromatic, or Oxyindole Spacers.
Macromolecules **39**, 4696-4703 (2006).

17. A. Nogales, A. Sanz, T. A. Ezquerra, R. Quintana y S. Muñoz-Guerra.
Molecular Dynamics of Poly(Butylene Tert-Butyl Isophthalate) and Its Copolymers with Poly(Butylene Terephthalate) as Revealed by Broadband Dielectric Spectroscopy.
Polymer **47**, 7078-7084 (2006).

18. A. Nogales, A. Sanz y T. A. Ezquerra.
On the Role of the β Process as Precursor of the α Relaxation in Aromatic Polyesters.
Journal of Non Crystalline Solids **352**, 4649-4655 (2006).

19. M. J. Cánovas, I. Sobrados, J. Sanz, J. L. Acosta y A. L. Linares.
Proton Mobility in Hydrated Sulfonated Polystyrene. NMR and Impedance Studies.
Journal of Membrane Science **280**, 461-469 (2006).

20. A. L. Linares, J. L. Acosta y S. Rodríguez.
Proton Conducting Blends Based on Polysulfones and Elastomers.
Journal of Applied Polymer Science **100**, 3474-3482 (2006).

21. M. A. Barrera, J. F. Vega, M. Aguilar y J. Martínez-Salazar.
Melt Flow Index on High Molecular Weight Polyethylene: A Comparative Study of Experiments and Simulation.
Journal of Materials Processing Technology **174**, 171-177 (2006).

22. N. J. L. Van Ruth, J. F. Vega, S. Rastogi y J. Martínez-Salazar.
Viscoelastic Behaviour during the Crystallization of Isotactic Polypropylene.
Journal of Materials Science **41**, 3899-3905 (2006).

23. S. Rastogi, J. F. Vega, N. J. L. Van Ruth y A. E. Terry.
Non-Linear Changes in the Specific Volume of the Amorphous Phase of Poly(4-Methyl-1-Pentene); Kauzmann Curves, Inverse Melting, Fragility.
Polymer **47**, 5555-5565 (2006).

24. J. Peón, J. F. Vega, M. Aroca y J. Martínez-Salazar.
Rheological Behaviour of LDPE/EVAc Blends. II. Linear Viscoelasticity and Extrusion Properties.
Journal of Materials Science **41**, 4814-4822 (2006).

25. N. Haider, M. T. Expósito, A. Muñoz-Escalona, J. Ramos, J. F. Vega, L. Méndez y J. Martínez-Salazar.
Synthesis and Properties of Ethylene/Styrene Copolymers Produced by Metallocene Catalysts.
Journal of Applied Polymer Science **102**, 3420-3429 (2006).

26. M. Lobón-Poo, J. Osío Barcina, A. García Martínez, M. T. Expósito, J. F. Vega, J. Martínez-Salazar y M. L. Reyes.
Meso-[Norbornane-7,7-Bis(Indenyl)]Titanium Dichloride: A Highly Active Catalyst for Ethylene-Styrene Copolymerization.
Macromolecules **39**, 7479 -7482 (2006).

27. S. Martínez, J. Ramos, V. Cruz y J. Martínez-Salazar.
Effect of the $Et(H_4Ind)_2Zr(CH_3)_2$ Catalyst on the Copolymerization of Ethylene and Styrene: A Computational Study.
Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry **44**, 4752–4761 (2006).

28. S. Martínez, J. Ramos, V. L. Cruz y J. Martínez-Salazar.
A QM/MM Study of the Ethylene and Styrene Insertion Process into the Ion Pair $[Me_2Si(C_5Me_4)(N^tBu)Ti(CH_2CH_2CH_3)]^+[\mu\text{-}Me\text{-}Al(Me)_2\text{-}(AlOMe)_6Me]^-$.
Polymer **47**, 883-896 (2006).

29. D. Cardona, W. Quiñones, F. Torres, S. Robledo, I. D. Vélez, V. Cruz, R. Notario y F. Echeverri.
Leishmanicidal Activity of Withajardins and Acnistins. An Experimental and Computational Study.
Tetrahedron **62**, 6822-6829 (2006).

30. M. A. Ramos, I. M. Shmyt'ko, E. A. Arnautova, R. J. Jiménez-Riobóo, V. Rodríguez-Mora, S. Vieira y M. J. Capitán.
On the Phase Diagram of Polymorphic Ethanol: Thermodynamic and Structural Studies.
Journal of Non-Crystalline Solids **352**, 4769–4775 (2006).

31. M. J. Capitán, J. Álvarez, J. J. Calvente y R. Andreu.
Onset of Crystalline Order in 1-Nonanethiol Monolayers Deposited from Solution.
Angewandte Chemie **45**, 6166-6169 (2006).

Publicaciones no recogidas en el SCI:

R. K. Bayer y F. J. Baltá Calleja.
Nanostructure of Potato Starch Part I: Early Stages of Retrogradation of Amorphous Starch in a Humid Atmosphere as Revealed by Simultaneous of SAXS and WAXS.
International Journal of Polymeric Materials **55**, 773-788 (2006).

Publicaciones conjuntas con otros Dptos. detalladas anteriormente:

M. C. García-Gutiérrez, A. Nogales, D. R. Rueda, C. Domingo, J. V. García-Ramos, G. Broza, Z. Roslaniec, K. Schulte, R. J. Davies y T. A. Ezquerra.
Templating of Crystallization and Shear-Induced Self-Assembly of Single-Wall Carbon Nanotubes in a Polymer-Nanocomposite.
Polymer **47**, 341-345 (2006).

6.2 LIBROS, MONOGRAFÍAS Y PUBLICACIONES DE *PROCEEDINGS*

6.3 TESIS DOCTORALES

6.3.3 DPTO. DE FÍSICA MACROMOLECULAR

Título: **Síntesis y caracterización de copolímeros de etileno/estireno obtenidos con catalizadores de centro activo único.**
Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 4 de septiembre de 2006.
Calificación: Sobresaliente "cum laude".
Doctorando: **Teresa Expósito Espinosa.**
Director: **Javier Martínez-Salazar Bascuñana y Javier Ramos Díaz.**

Título: **Estudio computacional de la reacción de copolimerización de etileno y estireno activada por catalizadores organometálicos homogéneos.**
Universidad: Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: 26 de mayo de 2006.
Calificación: Sobresaliente "cum laude".
Doctorando: **Sonia Martínez Hedo.**
Director: **Víctor Cruz Cañas y Javier Ramos Díaz.**

Título: **Nanostructure and Surface Micromechanical Properties of Multilayered Polymer Materials.**
Universidad: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: 9 de junio de 2006.
Calificación: Sobresaliente "cum laude".
Doctorando: **Inés Puente Orench.**
Director: **Francisco José Baltá Calleja y Fernando Ania García.**

CAPÍTULO 7

TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA

7.1. Proyectos con empresas

Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins (DOW Chemicals, Marzo 2006-Marzo 2007) IP: Javier Martínez de Salazar Bascuñana y J.F. Vega.

7.2. Seminarios

- **V. Cruz Cañas,** "Efecto del co-catalizador MAO en la síntesis de poliolefinas con catalizadores de centro activo único", **IEM/Repsol-YPF**, IEM (CSIC) 22 de marzo de 2006.

- **J. Sancho**, "Efecto del sustituyente en el ligando del catalizador de centro activo único en las características moleculares de poliolefinas", **IEM/Repsol-YPF**, IEM (CSIC), 22 de marzo de 2006

- **J.F. Vega**, "Reología de polietilenos obtenidos mediante síntesis dual", **IEM/Repsol-YPF**, IEM (CSIC), 22 de marzo de 2006.

- **J. Martínez-Salazar,** "Arquitectura molecular y estructura de polietilenos obtenidos mediante síntesis dual", **IEM/Repsol-YPF**, IEM (CSIC), 22 de marzo de 2006.

- **J. Martínez-Salazar**, "Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins: Structure and orientation by X-Ray Diffraction", **IEM/Dow Chemicals**, IEM (CSIC), 8 de Julio de 2006

- **J.F. Vega**, "Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins: Literature results on LLDPE/LDPE blends", **IEM/Dow Chemicals**, IEM (CSIC), 8 de Julio de 2006

- **N. Robledo**, "Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins: Preliminary results of pure components", **IEM/Dow Chemicals**, IEM (CSIC), 8 de Julio de 2006

- **J. Otegui**, "Polietilenos obtenidos mediante síntesis dual: estado del arte", **IEM/Repsol-YPF**, Centro Tecnológico de Repsol-YPF (Móstoles), 4 de diciembre de 2006

7.3. Informes de transferencia tecnológica

- **J.F. Vega, M.T. Expósito, J. Otegui and J. Martínez-Salazar,** "Polyethylenes from dual catalysis", Repsol-YPF Mayo, 2006)
- **N. Robledo, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar**, "Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins: Preliminary results of pure components", Dow Chemicals (Junio, 2006)
- **N. Robledo, J.F. Vega, J. Martínez-Salazar**, "Study of the relationships between solid state morphology and melt state properties of blends of linear low density polyethylene and other polyolefins: Melt rheology and mechanical properties", Dow Chemicals (Noviembre, 2006)

7.4. Estancias de investigadores

- **M.T. Expósito,** en Repsol-YPF (desde Mayo a Diciembre de 2006) realizando un trabajo sobre "síntesis de polietilenos funcionalizados".