

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DECLARADA POLOS USUARIOS 2005

O presente informe inclúe a produción científica correspondente ao ano 2005 e para a cal os usuarios declaran ter utilizado os recursos dispoñibles no CESGA.

A seguinte táboa presenta o número de artigos publicados, enviados ou in-press; presentacións ou pósters en reunións científicas; teses doutorais, presentadas ou en proceso; libros ou capítulos de libros; Diplomas de Estudos Avanzados; teses de licenciatura e proxectos de investigación realizados:

PRODUTO	CSIC	UDC	USC	UVIGO	TOTAL
Artigos Científicos	49	10	59	29	147
Aceptados	3	2	7	4	16
Enviados	10	1	15	1	27
Publicados	36	7	37	24	104
Presentacións en Conferencias/Congresos	21	4	33	7	65
Presentacións	10	4	22	1	37
Posters	11	0	11	6	28
Teses Doutorais	5	6	10	3	24
En proceso	2	4	8	1	15
Defendidas	3	2	2	2	9
Teses Licenciatura/Proxectos Fin Carreira	6	3	4	1	14
En proceso	0	1	0	0	1
Defendidas	6	2	4	1	13
Libros/Capítulos	3	0	1	1	5
Aceptados/In press	3	0	0	1	4
Enviados	0	0	1	0	1
Publicados	0	0	0	0	0
Outros	0	0	2	3	5
TOTAL POR INSTITUCIÓN	84	23	109	44	260

Estas cifras correspóndense aos seguintes índices porcentuais de usuarios que declararon produción científica, coas súas respectivas horas de consumo:

	2004	2005
PORCENTAXE DE USUARIOS QU E DECLARAN PRODUCCIÓN	78´57%	87,40%
PORCENTAXE DE HORAS CONSUMIDAS POR ESTES	90´01%	98,32%

A continuación, presentamos unha táboa comparativa da produción científica declarada polos usuarios nos anos 2002, 2003, 2004 e 2005, na que se pode observar o incremento constante da mesma:

PRODUTO	2002	2003	2004	2005
Artigos Científicos	93	107	134*	147
Aceptados	4	8	20	16
Enviados	16	29	26	27
Publicados	73	70	91	104
Presentacións en Conferencias/Congresos	42	52	72*	65
Presentacións	33	40	53	37
Posters	9	12	35	28
Teses Doutorais	17	21	32	24
En proceso	8	17	27	15
Defendidas	9	4	5	9
Teses Licenciatura/Proxectos Fin Carreira	12	9	12	14
En proceso	6	5	7	1
Defendidas	6	4	5	13
Libros/Capítulos	ND	ND	ND	ND
Aceptados/In press	ND	ND	ND	4
Enviados	ND	ND	ND	1
Publicados	ND	ND	ND	0
Outros	5	5	6	5
TOTAL	169	194	256	260

* 8 PUBLICACIÓN E 16 CONGRESOS ASINADOS POR MÁIS DUNHA INSTITUCIÓN

Produción científica declarada por grupos de traballo do Consejo Superior de Investigaciones Científicas - CSIC

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.L.Senent, M.Villa, A.Fernández-Clavero and R.Domínguez-Gómez, “Ab initio study of the far infrared spectrum of glycine”, Int.J.Quant.Chem., 104, 551-561 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.L.Senent, M.Villa, F.J.Meléndez y R. Domínguez-Gómez, “Ab initio study of the rotational-torsional spectrum of methyl format”. ApJ, 627, 567-576 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, G. Avila. “Ab initio dipole polarizability surfaces of water molecule: Static and dynamic at 514.5 nm” .J. Chem. Phys. 122, 144310 (2005) (10 pages).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Josep M. Anglada and Victor M. Domingo; Mechanism for the Gas-Phase Reaction between Formaldehyde and Hydroperoxyl Radical. A Theoretical Study. J. Phys. Chem. A, 2005, 109, 10786-10794.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Begoña Martínez Cruz, José A. Godoy. “Un modelo coalescente suxiere unha recente diverxencia das dúas especies de auga imperial”. Revista Dixitos, Novembro 2005, pp 6-7.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Kaczmariski, O. N. Bedoya-Martinez and E. R. Hernandez, “Phase Diagram of Silicon from Atomistic Simulations”. Physical Review Letters vol. 94, 095701 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. García-Vela. "A Full-Dimensional Quantum Dynamical Approach to the Vibrational Predissociation of Cl₂-He²". J. Chem. Phys. **122** (2005) 14312.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. García-Vela. "Calculation of Cl₂ Vibrational Distributions after Vibrational Predissociation of Cl₂-He²". J. Chem. Phys. **122** (2005) 216101.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. García-Vela. "An Empirical Potential Energy Surface for the He-Br₂(B) van der Waals Complex". J. Phys. Chem. A **109** (2005) 5545.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. García-Vela. "An Empirical Potential Energy Surface for the He-I₂(B) van der Waals Complex Including Three Body Effects". J. Chem. Phys. **123** (2005) 124311.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M. P. de Lara-Castells, D. López-Durán, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco and Jellinek. Energies and density distributions of (He)_N clusters doped with Br₂(X): A Hartree-like approach. In: Physical Review A **71**, 033203 (2005), 1-10.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Cono Di Paola, Franco A. Gianturco, David López-Durán, María Pilar de Lara-Castells, Gerardo Delgado-Barrio, Pablo Villarreal and Julius Jellinek. Br₂(X) Microsolvation in Helium Clusters: Effect of the Interaction on the Quantum Solvent Density Distribution. In: CHEM PHYS CHEM **6**, 1 (2005), 1348-1356.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ramón Hernández-Lamonedá, Massimiliano Bartolomei, Marta I. Hernández and José Campos-Martínez y Fabrice Dayou. "Intermolecular Potential of the O₂-O₂ Dimer. An ab Initio Study and Comparison with Experiment". J. Phys. Chem. A **2005**, 109, 11587-11595.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. Valdés, R. Prosmiti, P. Villareal and G. Delgado-Barrio. "Ab initio calculations, potential representation and vibrational dynamics of He²-Br² van der Waals complex". J. Chem. Phys., **122**, 044305-1-8 (2005).
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, A. Valdés, R. Prosmiti, P. Villareal and G. Delgado-Barrio. "Potential Energy Surfaces for triatomic and tetraatomic van der Waals complexes". Lecture Series on Computer and Computational Sciences, **4**^a 479-482. ISBN=90-6764-4439 (2005).
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, G. Delgado-Barrio, R. Prosmiti, A. Valdés and P. Villareal. "Potential Energy Surfaces for triatomic and tetraatomic van der Waals complexes". Phys. Scripta, **73**, C57-C63 (2006).
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Córdoba, D.; Fontelos, M. A.; Mancho, A. M.; Rodrigo, J. L. Evidence of singularities for a family of contour dynamics equations. Proc. Natl. Acad. Sci. **102** (2005), 17, 5949-5952.
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Cruz, V; Ramos, J; Martínez, S; Muñoz-Escalona, A; Martínez-Salazar. "Structure-Activity relationship study of the metallocene catalyst activity in ethylene polymerization". Organometallics, **24**(21): 5095-5102 2005. Available online at <http://pubs3.acs.org/acs/journals/toc.page?incoden=orgnd7&indecade=0&involume=24&inissue=21>
- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ramos, J; Muñoz-Escalona, A; Martínez, S; Martínez-Salazar, J.; Cruz, V. "Ethylene-styrene copolymerization with constrained geometry catalysts. A Density Functional Study". Chem. Phys. **122**: 074901-4 (2005). Available online at <http://scitation.aip.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=JCPSA6000122000007074901000001&idtype=cvips&gifs=yes>

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Martínez, S; Expósito, MT; Ramos, J. Cruz, V; Martínez, MC; Muñoz-Escalona, A; Martínez-Salazar J. “An experimental and computational evaluation of ethylene/styrene copolymerisation using a homogeneous single-site titanium (IV)-constrained geometry catalyst”. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry* 43 (4):693-710 (2005). Available online at <http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/jissue/109861128>

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Marina Sánchez, Patricio F. Provasi, Gustavo A. Aucar, Ibon Alkorta and Jose Elguero. Theoretical Study of HCN and HNC Neutral and Charged Clusters. *J. Phys. Chem. B* 2005, 109, 18189-18194.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta and José Elguero. Barriers to the Intramolecular N-to N-Transfer of Different Groups in Pyrazoles: Prototropy vs. Elementotropy. *Heteroatom Chemistry*. Volume 16, 2005, pg. 628-636.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, Óscar Picazo, and José Elguero. Chiral Discrimination in Lithium Complexes of Bis(5H-pyrroles) and Bis(oxazolines). *J. Phys. Chem. A* 2005, 109, 9573-9577.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Oscar Picazo, Ibon Alkorta, and José Elguero. Dimers of 1,8a-Dihydro-1,8-Naphthyridine Derivatives as Models of Chiral Self-Recognition. *Structural Chemistry*, Vol. 16, pg. 339-345 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Óscar Picazo, Ibon Alkorta, Jose Elguero, Otilia Mó and Manuel Yáñez. Chiral recognition in phosphinic acid dimers. *J. Phys. Org. Chem.* 2005; 18: 491–497.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Rosa M. Claramunt, Dionisia Sanz, Ibon Alkorta and José Elguero. A theoretical study of multinuclear coupling constants in pyrazoles. *Magn. Reson. Chem.* 2005; 43: 985–991.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, Carlos Cativiela, José Elguero, Ana M. Gil and Ana I. Jiménez. A theoretical study of the influence of nitrogen angular constraints on the properties of amides: rotation/inversion barriers and hydrogen bond accepting abilities of N-formylaziridine and –azirine. *New J. Chem.*, 2005, 29, 1450–1453.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Om Prakash, Ajay Kumar, Anil Sadana, Richa Prakash, Shiv P. Singh, Rosa M. Claramunt, Dionisia Sanz, Ibon Alkorta and José Elguero. Study of the reaction of chalcone analogs of dehydroacetic acid and o-aminothiophenol: synthesis and structure of 1,5-benzothiazepines and 1,4-benzothiazines. *Tetrahedron* 61 (2005) 6642–6651.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, Óscar Picazo and José Elguero. Effect of fluoro substituents and central atom nature on chiral derivatives of bisdiphenylborates and isoelectronic structures. *Tetrahedron: Asymmetry* 16 (2005) 755–760.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, José Elguero. A Theoretical Study on the Tautomerism of C-Carboxylic and Methoxycarbonyl Substituted Azoles. *Structural Chemistry*, Vol. 16, pg. 507-514 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, Oscar Picazo, and José Elguero. Chiral Recognition in Cyclic α -Hydroxy Carbonyl Compounds: A Theoretical Study. *J. Phys. Chem. A* 2005, 109, 3262-3266

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Krzysztof Zborowski, Leonard M. Proniewicz, Ibon Alkorta, José Elguero. Effect of HB complexation on the optical rotatory power of oxiranes. *Chemical Physics Letters* 409 (2005) 163–166.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Corzana F, Cuesta I, Bastida A, Hidalgo A, Latorre M, Gonzalez C, Garcia-Junceda E, Jimenez-Barbero J, Asensio JL. "Molecular recognition of aminoglycoside antibiotics by bacterial defence proteins: NMR study of the structural and conformational features of streptomycin inactivation by *Bacillus subtilis* aminoglycoside-6-adenyl transferase". CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 11 (17): 5102-5113 AUG 19 2005.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Bastida A, Hidalgo A, Chiara JL, Torrado M, Corzana F, Perez-Canadillas JM, Groves P, Garcia-Junceda E, Gonzalez C, Jimenez-Barbero J, Asensio JL. "Exploring the use of conformationally locked aminoglycosides as a new strategy to overcome bacterial resistance". JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 128 (1): 100-116 JAN 11 2006.

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, C.I. Sainz-Díaz, E. Escamilla Roa, and A. Hernández Laguna, "Quantum mechanical calculation of trans-vacant and cis-vacant polymorphism in dioctahedral 2:1 phyllosilicates", American Mineralogist, 90, 1827-1834 (2005).

- CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Timón, M. I. Suero, M.J. Martín Delgado, V. Botella y A. Hernández Laguna, "DFT critical points of the internal rotation potential energy surface and infrared spectra of the [1H], [2H] 2,5-pyrazinedicarboxamide. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 714, 73 - 79 (2005).

- CSIC, LIBRO, IN PRESS, N.Feautrier, J.Cernicharo, F.Daniel, M.L.Dubernet, F.Lique, M.L.Senent and A.Spielfiedel, Hunt for Molecules, F.Combes, Fcasoli, E.Falgarone, L.Pagani (eds), "Molecules as a diagnostic tool in Astrophysics".

- CSIC, CAPÍTULO, IN PRESS, A. Valdés, R. Prosmiiti, P. Villareal and G. Delgado-Barrio. "Ab initio van der Waals potential energy surfaces. Application to complexes of Br₂ with Helium atoms". Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Kluwer series (The Netherlands), in press (2005).

- CSIC, REVIEW, IN PRESS, G. Delgado-Barrio, D. López-Durán, Á. Valdés, R. Prosmiiti, M.P. de Lara-Castells, T. González-Lezana and P. Villareal. "Structure and dynamics of van der Waals complexes: from triatomic to medium size clusters". In Proceedings of XXIV ICPEAC, World Scientific, in press (2005).

- CSIC, ARTÍCULO, IN PRESS, Alex Mansergas and Josep M. Anglada; Reaction Mechanism between Carbonyl Oxide and Hydroxyl Radical: A Theoretical Study., J. Phys. Chem. A, Aceptado para publicación.

- CSIC, ARTIGO, IN PRESS, M. C. Capel-Sanchez, V. A. de la Peña-O'Shea, L. Barrio, J. M. Campos-Martin, J. L. G. Fierro. TD-DFT analysis of the electronic spectra of Ti-containing catalysts.

- CSIC, ARTIGO, IN PRESS, Roberto Benito, Manuel de León y D. Martín de Diego. "Higher-order discrete lagrangian mechanics". International Journal of Geometric Methods in Modern Physics en junio de 2006.

- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, Gonzalez, A Chaouiya, C Thieffry, D. "Dynamical analysis of the regulatory network defining the dorsal-ventral boundary of the wing imaginal disc".

- CSIC, ARTÍCULO, ENVIADO, M.. Torrent-Sucarrat and J. M. Anglada ; On The Gas Phase Hydrogen bond Complexes between Formic Acid and Hydroperoxyl Radical. A Theoretical Study.

- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, E. Carmona-Novillo, M. Bartolomei, M. I. Hernández, J. Campos-Martínez. "A quassical study of reaction and dissociation in H₂ + H₂", PCCP.

- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, A. García-Vela y K.C. Janda. "Quantum Dynamics of Ne-Br₂ Vibrational Predissociation: The Role of Continuum Resonances as Doorway States". J. Chem. Phys. {bf 124} (2006) 034305.

- CSIC, CAPITULO, ENVIADO, G. Delgado-Barrio, D. López-Durán, Á. Valdés, R. Prosmi, M.P. de Lara-Castells, T. González-Lezana and Villareal. "PESs and dynamics of He_NBr_2 van der Waals complexes". Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Kluwer series (The Netherlands), submitted (2005).
- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, A. Valdés, R. Prosmi, P. Villareal, G. Delgado-Barrio and H-J Werner. "Ab initio calculations of potential surface of the B state HeI_2 complex". J. Chem. Phys, submitted (2005).
- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, A. Valdés, R. Prosmi, P. Villareal and G. Delgado-Barrio. "A theoretical study of the He_2ICl van der Waals complex". J. Chem. Phys., submitted (2005).
- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, Susana Casado, Mercedes Alonso, Bernardo Herradón, José M^a Navas. "Ability of the carbaryl molecule to take a planar conformation in its interaction with the aryl hydrocarbon receptor: Experimental and computational evidences".
- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, Santiago Patiri (IAC), J. Betancort-Rijo (IAC), Francisco Prada (IAA, CSIC), Anatoly Klypin (NMSU) y Stefan Gottloeber (AIP). "Statistics of Voids in the 2dF Galaxy Redshift Survey". Mon. Not. R. Astron. Soc.
- CSIC, ARTIGO, ENVIADO, Chem. Eur. J.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, R.Domínguez-Gómez, M.L.Senent, M.Villa, y F.J.Meléndez. "Ab initio study of the rotational-torsional spectrum of methyl format". Congreso: 19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy (Salamanca, Septiembre 2005).
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Eduardo Hernandez. "Phase diagram of silicon from atomistic simulations". Congreso: JEEP2005 "XXXI Journées d'Etude des Equilibres entre Phases". Lugar y fecha: Barcelona, 31 marzo a 1 abril 2005.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Eduardo Hernandez, "Phase diagram of silicon from atomistic simulations". Congreso: Psi-K 2005 conference. Lugar y fecha: Schwaebisch Gmuend (Alemania), 17-21 de septiembre 2005.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A. García Vela, "Quantum Dynamics of Ne-Br2 Vibrational Predissociation: Evidence of Doorway Resonance States". Congreso: X European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, QSCP X. Lugar de celebración: Cartago (Túnez). Fecha: 1-7/10/2005.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, R. Prosmi, "Potential Energy Surfaces for van der Waals complexes". Congreso: ICCMSE-2005. Lugar de celebración: Loutraki (Greece), 2005.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, R. Prosmi, "Structure and Dynamics of triatomic and tetraatomics van der Waals clusters. Congreso: QSCP-X. Lugar de celebración: Carthage (Tunis), 2005.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Bernardo Herradón, Mercedes Alonso, Roberto Chicharro, M^a Teresa Mazo, Carlos Miranda, Ana Montero, Vicente J. Arán. "Híbridos Péptido-Molde: Síntesis, Estructura Y Propiedades". Congreso: X Encuentro Peptídico Ibérico, Zaragoza, 1-4 Febrero de 2006.
- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Congreso: 20th International Workshop on Differential Geometric Methods in theoretical Mechanics. Gante (Bélgica), agosto de 2005.

- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Workshop Pattern Formation in Fluid Dynamics. In: The Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences. University of Cambridge, UK. More information at <http://www.newton.cam.ac.uk/webseminars/pg+ws/2005/pfd/pfdw05/1212/mancho/>

- CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, 2005 58th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics. Sunday–Tuesday, November 20–22, 2005; Chicago, IL. More information at <http://meetings.aps.org/Meeting/DFD05/Event/37782>

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, H. Massó, M.L. Senent, J.R. Goicochea and J. Chernicharo y M. Hochlaf. “Interstellar C4: ab initio theoretical study”. Congreso: 19 th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Salamanca, septiembre 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, Begoña Martínez Cruz, José A. Godoy. “Conservation genetics of the Spanish imperial eagle”. Congreso: ESF Conservation Genetics Workshop: Refining the conservation genetics paradigm: genetic sources of extinction, environmental stress, and the maintenance of adaptive diversity.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, Natalia Bedoya, Marcin Kaczmarek, Eduardo Hernandez. “Free energy simulations of the melting temperature in transition metals”. Congreso: Psi-K 2005 conference. Lugar y fecha: Schwaebisch Gmuend (Alemania), 17-21 de septiembre 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, Natalia Bedoya, Marcin Kaczmarek, Eduardo Hernandez. “Phase diagram of silicon from atomistic simulations”. Congreso: State of the art, developments and perspectives of real-space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics. Lugar y fecha: Lyon, Francia, junio del 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, A. Valdés, R. Prosmiti, P. Villareal, G. Delgado-Barrio, J-H Werner. “Three-Dimensional Ab initio Potential Energy Surface and Spectra of the B state HeI₂ complex”. Congreso: IBER 2005. Lisboa, 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, A. Valdés, R. Prosmiti, P. Villareal, G. Delgado-Barrio. “Dihalogens and rare gases: Potential Energy Surfaces and Dynamics”. Congreso: IBER 2005. Lisboa, 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, L. Barrio, J. M. Campos-Martin e J. L. G. Fierro. An spectroscopic and DFT study of the interactions between tungstic acid and hydrogen peroxide. In: VII European Congress on Catalysis, 28 agosto-1 septiembre 2005, Sofia Bulgaria. Available on www.europacat.org

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, S. Martínez, Víctor L. Cruz, J. Ramos, J. Martínez-Salazar. Presentación del póster: Estudio Computacional [Me₂Si(C₅Me₄)(NtBu)Ti(CH₃)₂]/MAO como catalizador en la polimerización de etileno y estireno. Congreso: IX Reunión del GEP (Grupo Especializado de Polímeros). Jaca (Huesca). Septiembre 2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, Escribano Torres, R. Congreso: 19th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy. Lugar celebración: Salamanca. Data: 11-16/10/2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, M.E. Molina-Montes, D. Donadio, A. Hernández-Laguna, C.I. Sainz-Díaz and M. Parrinello. Póster: Ab initio Molecular Dynamics of the pyrophyllite dehydroxylation. Congreso: CPMD 2005 Workshop "Ab-initio Molecular Dynamics Simulations - from Solid State Physics to Chemistry and Biology" and Symposium. Lugar celebración: Monte Verita -Ascona (Suiza). Data: 3-8/10/2005.

- CSIC, CONGRESO, PÓSTER, M.E. Molina-Montes, D. Donadio, A. Hernández-Laguna, C.I. Sainz-Díaz and M. Parrinello. Póster: The rehydroxylation in Pyrophyllite by means of ab initio Molecular Dynamics and metadynamics. Congreso: CPMD 2005 Workshop "Ab-initio Molecular Dynamics Simulations

- from Solid State Physics to Chemistry and Biology" and Symposium. Lugar celebración: Monte Verita - Ascona (Suiza). Data: 3-8/10/2005.

- CSIC, TESE, DEFENDIDA, H. Massó.

- CSIC, TESE, DEFENDIDA, Begoña Martínez Cruz, "Genética de la conservación del águila imperial ibérica (*Aquila adalberti*)". Directores de tese: José A. Godoy López, Juan J. Negro Balmaseda. Universidad de Sevilla. Depositada en octubre de 2004, defendida el 31 de enero 2005.

- CSIC, TESE, DEFENDIDA, E. Escamilla Roa "Investigación mecanocuántica de la estructura cristalina, propiedades espectroscópicas y reactividad de filosilicatos 2:1 dioctaédricos" Defendida en la Universidad de Granada el 23 de Diciembre de 2005 con la calificación de Sobresaliente "Cum Laude" y dirigida por los doctores A. Hernández Laguna y C. I. Sainz Díaz.

- CSIC, TESE, EN PROCESO, D. Sergio López López. "Estudio de la fotodisociación de agregados con enlace de hidrógeno".

- CSIC, TESE, EN PROCESO, Pedro Roberto Benito Prieto.

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, Investigación Teórica de la estructura y distribución catiónica isomórfica en filosilicatos 2:1. Diploma de Estudios Avanzados. Grupo de Química Teórica y Modelización Molecular. Departamento de Ciencias de la Tierra y Química Ambiental. Estación Experimental del Zaidín. (CSIC). Granada.

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, "Investigación Teórica de Estructura y Reactividad de Silicatos Laminares 2:1"

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, Mercedes Alonso Giner. "Estudios computacionales de compuestos aromáticos"

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, María Esther Molina Montes, "Estudio mecano-cuántico del efecto de la sustitución isomórfica en la adsorción de cationes de la superficie de filosilicatos mediante modelos moleculares", defendida en Junio de 2005 en la Universidad de Granada, obteniendo la calificación de Sobresaliente, y dirigida por los Drs. A. Hernández-Laguna y C. I. Sainz Díaz.

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, Noemí Hernández Haro "Investigación teórica de estructura y reactividad de silicatos laminares 2:1" defendida en la Universidad de Granada en Septiembre de 2005, obteniendo la calificación de Sobresaliente, y dirigida por los Dres. A. Hernández Laguna y C. I. Sainz Díaz.

- CSIC, TESINA, DEFENDIDA, Joaquín Ortega Castro, "Investigación teórica de la estructura y distribución catiónica isomórfica en filosilicatos 2:1 dioctaédricos", defendida en la Universidad de Granada en Septiembre de 2005, obteniendo la calificación de Sobresaliente, y dirigida por los Drs. A. Hernández Laguna y C. I. Sainz Díaz.

Producción científica declarada por grupos de trabajo da Universidade da Coruña - UDC

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, C. Platas-Iglesias, D. Esteban-Gómez, T. Enríquez-Pérez, F. Avecilla, A. de Blas, T. Rodríguez-Blas. "Lead(II) Thiocyanate Complexes with Bibracchial Lariat Ethers: A X-ray and DFT Study". Inorg. Chem., 44, 2224-2233 (2005).

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, M. González-Lorenzo, C. Platas-Iglesias, F. Avecilla, S. Faulkner, S. J. A. Pope, A. de Blas, T. Rodríguez-Blas. "Structural and Photophysical Properties of Lanthanide(III) Complexes with a Novel Octadentate Iminophenolate Bibracchial Lariat Ether". *Inorg. Chem.*, 44, 4254-4262 (2005).

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Marta Mato-Iglesias, Carlos Platas-Iglesias, Kristina Djanashvili, Joop A. Peters, Éva Tóth, Edina Balogh, Robert N. Muller, Luce Vander Elst, Andrés de Blas, Teresa Rodríguez-Blas. "The highest water exchange rate ever measured for a Gd(III) chelate". *Chem. Commun.*, 4729-4731 (2005).

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Carlos Platas-Iglesias, Lea Vaiana, David Esteban-Gómez, Fernando Avecilla, José Antonio Real, Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. "Electronic Structure Study of Seven-coordinate First-row Transition Metal Complexes Derived from 1,10 diaza-15-crown-5: A Successful Marriage of Theory with Experiment". *Inorg. Chem.*, 44, 9704-9713 (2005).

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Ana Ardá, Jaime Rodriguez, Rosa M. Nieto, Carla Bassarello, Luigi Gómez-Paloma, Giuseppe Bifulcob and Carlos Jiménez. NMR J-based analysis of nitrogen-containing moieties and application to dysithiazolamide, a new polychlorinated dipeptide from *Dysidea* sp. *Tetrahedron* 61 (2005) 10093–10098. Available on http://www.sciencedirect.com/science?_ob=ArticleURL&_udi=B6THR-4GY88VC-1&_user=2345166&_handle=V-WA-A-W-WY-MsSWYWW-UUW-U-AAVUWVZADZ-AABDYWZEDZ-CEYYVBWWW-WY-U&_fmt=summary&_coverDate=10%2F17%2F2005&_rdoc=20&_orig=browse&_srch=%23toc%235289%232005%23999389957%236065071&_cdi=5289&_view=c&_acct=C000057004&_version=1&_urlVersion=0&_userid=2345166&md5=9a5878f82c2a6e641b809182436c8a37.

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, M.E.D. Azenha, H.D. Burrows, M. Canle L., R. Coimbra, M. I. Fernández, M. V. García, M. A. Peiteado, J. A. Santaballa, Oliva, J., Serrano-Andrés, L. "On the low-lying excited states of sym-triazine based herbicides". *Chem Phys Chem* v. 6, pp 306-314, 2005.

- UDC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Canle L., M. I. Fernández, J. A. Santaballa, "Developments on the Mechanism of Photodegradation of Triazine-Based Pesticides". *Journal of Physical Organic Chemistry*, v.18, 148-155, 2005.

- UDC, ARTIGO, IN PRESS, B.B. Fraguera, M.G. Carmueja, D. Andrade. Optimal Tile Size Selection Guided by Analytical Models. *Proc. Parallel Computing 2005 (ParCo 2005)*. Málaga, Septiembre 2005. Available on <http://www.ac.uma.es/parco2005/program.html>.

- UDC, ARTIGO, IN PRESS, M. Canle L., D. Rodríguez Ramos, J.A. Santaballa. "A DFT study on the microscopic ionization of cysteine in water". *Chemical Physics Letters* 417 (2006) 28-33. Available online at www.sciencedirect.com.

- UDC, ARTIGO, ENVIADO, Ana Ardá, Carlos Jiménez, and Jaime Rodríguez. Polychlorinated leucine derivatives: synthesis of (2S,4R)-5,5-dichloroleucine and J-based analysis. Enviado a *European J. Org. Chem.*

- UDC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. Canle-López., M.I. Fernández, R. Pou, J.A. Santaballa y L. Serrano-Andrés. "Short-lived intermediates generated upon UV light-absorption by triazine-based herbicides". Tipo de participación: Oral. Congreso: VII Encontro Nacional de Química Física. Lugar celebración: Porto (Portugal). Data: 5-7/05/2005.

- UDC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J. Andrés, M. Canle-López., M.V García, V. Polo, y J.A. Santaballa. "Catastrophe Theory and Electron Localization Function (ELF) Analysis of the Amines Oxidation

by Hypohalous Acids”. Tipo de participación: Oral. Congreso: X European Symposium in Organic Reactivity (ESOR X). Lugar celebración: Roma (Italia). Data: 25-30/07/2005.

- UDC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. Canle-López., M.I. Fernández, M.V. García, J.M. Oliva y J.A. Santaballa. “Short-lived radical charged species derived from sym triazines”. Tipo de participación: Oral. Congreso: XXX Biental de la Real Sociedad Española de Química. Lugar celebración: Lugo (España). Data: 19-23/09/2005.

- UDC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. Canle-López., M.I. Fernández, A. Freire, M.A. Peiteado, R. Pou, J.A. Santaballa, M. Sarakha y L. Serrano-Andrés. “Short-lived species generated during the first stages of photodegradation of sulfonyl carbamates”. Tipo de participación: Oral. Congreso: XXX Biental de la Real Sociedad Española de Química. Lugar celebración: Lugo (España). Data: 19-23/09/2005.

- UDC, TESE, DEFENDIDA, “Complejos de los Iones Ln(III) con Azacoronas Funcionalizadas”. Doutorando: Marina González Lorenzo. Universidade: Universidade da Coruña. Facultade de Ciencias. Data: Xullo 2005. Calificación: Sobresaliente Cum Laude

- UDC, TESE, DEFENDIDA, Manuel A. Peiteado Peiteado, aprobada a súa presentación, data estimativa de exposición: xuño 2005. Título: “Estudios fotofísicos y fotoquímicos sobre el aminoácido aromático N-fenilglicina”.

- UDC, TESE, EN PROCESO, Mato Iglesias, Marta, “Complejos de los Lantánidos con Potenciales Aplicaciones Tecnológicas”. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas. Data prevista de defensa: 03/03/06.

- UDC, TESE, EN PROCESO, Luis F. Rodríguez Vázquez, previsión de defensa: finais do ano 2006. Tema: Reaccións de cloración de compostos nitroxenados.

- UDC, TESE, EN PROCESO, Daniel Rodríguez Ramos, previsión de defensa: setembro 2006. Tema: Caracterización cinética e computacional da acción oxidante do sistema enzimático mieloperoxidasa / peróxido de hidróxeno / ion cloruro.

- UDC, TESE, EN PROCESO, Antonio Freire Corbacho, previsión de defensa: finais do ano 2006. Tema: Degradación química e fotoquímica de pesticidas derivados das sulfonilureas.

- UDC, TESINA, DEFENDIDA, Raquel Ferreirós Martínez, “Estudio Conformacional del Zn-ciclam”. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas e Carlos Platas Iglesias. Data: Marzo 2005. Calificación: Sobresaliente.

- UDC, TESINA, DEFENDIDA, Martín Regueiro Figueroa, “Complejos de Cadmio(II) y Plomo(II) con Azacoronandos funcionalizados con Cadenas Colgantes Conteniendo Grupos Bencimidazol”. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas e Carlos Platas Iglesias. Data: Novembro 2005. Calificación: Sobresaliente.

- UDC, TESINA, EN PROCESO, Vaiana, Lea, “Complejos de Éteres Lariat Bibraquiales con metales de la primera serie de transición”. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas e Carlos Platas Iglesias.

Producción científica declarada por grupos de trabajo da Universidade de Santiago de Compostela - USC

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Adeva et al. "First Measurement of the $\pi^+\pi^-$ atom lifetime nB ", Phys. Lett. B 619 (2005), 50-60. Available online at arxiv.org/abs/hep-ex/0504044.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, A.J.García Loureiro, K.Kalna and A.Asenov. "Efficient three-dimensional parallel simulations of PHEMTs". International Journal of Numerical Modelling: Electronics networks, devices and field. Vol. 18, pp. 327-340 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Pereiro et al., Influence of interfacial scattering and surface roughness on giant magnetoresistance in Fe/Cr trilayers using ab initio layer potentials. J. Magn. Mater., 290-291, 392 (2005). Available on http://www.sciencedirect.com/science?_ob=ArticleURL&_aset=V-WA-A-W-Z-MsSAYWA-UUA-U-AAVUWCDZAE-AABDYBYVAE-CEEUCBCYZ-Z-U&_rdoc=3&_fmt=full&_udi=B6TJJ-4F1J580-4&_coverDate=04%2F30%2F2005&_cdi=5312&_orig=search&_st=13&_sort=d&_view=c&_acct=C000057006&_version=1&_urlVersion=0&_userid=2345338&md5=83c559879deb34db04109713bf2af0af

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Pardo, P. Blaha, M. Iglesias, D. Baldomir, K. Schwarz, M. Pereiro, J. Botana, J. E. Arias, Bandstructure study of magnetic and orbital order in BaCoO₃. J. Magn. Mater., 290-291, 349 (2005). Available on http://www.sciencedirect.com/science?_ob=ArticleURL&_aset=V-WA-A-W-Z-MsSAYWA-UUA-U-AAVUWCDZAE-AABDYBYVAE-CEEUCBCYZ-Z-U&_rdoc=2&_fmt=full&_udi=B6TJJ-4F1J580-K&_coverDate=04%2F30%2F2005&_cdi=5312&_orig=search&_st=13&_sort=d&_view=c&_acct=C000057006&_version=1&_urlVersion=0&_userid=2345338&md5=7a64d6aea338f92423771f9813ed91db

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Iglesias, A. Rodriguez, P. Blaha, V. Pardo, D. Baldomir, M. Pereiro, J. Botana, J. E. Arias, K. Schwarz, Ab initio electronic structure of rare earth orthoferrites. J. Magn. Mater., 290-291, 396 (2005). Available on http://www.sciencedirect.com/science?_ob=ArticleURL&_aset=V-WA-A-W-Z-MsSAYWA-UUA-U-AAVUWCDZAE-AABDYBYVAE-CEEUCBCYZ-Z-U&_rdoc=4&_fmt=full&_udi=B6TJJ-4F1J580-D&_coverDate=04%2F30%2F2005&_cdi=5312&_orig=search&_st=13&_sort=d&_view=c&_acct=C000057006&_version=1&_urlVersion=0&_userid=2345338&md5=ea7b3f606366b6cc6bf15e6790f5d00b

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Pereiro and D. Baldomir, Determination of the lowest-energy structure of Ag₈ from first-principles calculations. Phys. Rev. A 72, 045201 (2005). Available on <http://scitation.aip.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=PLRAAN00007200000404520100001&idtype=cvips&gifs=yes>.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, K. Warda, L. Wojtczak, D. Baldomir, M. Pereiro and J. Arias, An extended Boltzmann formalism for transport description in thin Fe-Cr-Fe trilayers phys. stat. sol. (c) 3, 73 (2006). Available on http://www3.interscience.wiley.com/search/allsearch?WISsearch2=pereiro&WISindexid=WISall&mode=quicksearch&products=journal&contextLink=%3Ca+href%3D%22%2Findex.html%22+target%3D%22_top%22%3EHome%3C%2Fa%3E+%2F+%3Ca+href%3D%22%2Fcgi-bin%2Fbrowsebysubject%3Fcode%3DPHYS%22+target%3D%22_top%22%3EPhysics+and+Astronomy%3C%2Fa%3E+%2F+%3Ca+href%3D%22%2Fcgi-bin%2Fbrowsebycategory%3Fcode%3DPH60%22+target%3D%22_top%22%3ESolid+State+Physics%3C%2Fa%3E&contentOID=102519628&contentTitle=physica+status+solidi+%28c%29&WISindexid1=issn&WISsearch1=1610-1642&articleGo.x=0&articleGo.y=0

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Pardo, J. Rivas and D. Baldomir, "Effects of Sr doping on the magnetic properties of Sr_xBa_{1-x}CoO₃", Appl. Phys. Lett. 86, 202507 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Iglesias, A. Rodríguez, P. Blaha, V. Pardo, D. Baldomir, M. Pereiro, J. Botana, J.E. Arias and K. Schwarz, "Ab initio electronic structure of rare earth orthoferrites", J. Magn. Magn. Mater. 290-291, 396 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Pereiro, J. Botana, D. Baldomir, K. Warda, L. Wojtczak, S.V. Man'kovsky, M. Iglesias, V. Pardo and J.E. Arias, "Influence of interfacial scattering and surface roughness on giant magnetoresistance in Fe/Cr multilayers using ab initio layer potentials", J. Magn. Magn. Mater. 290-291, 392 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Pardo, P. Blaha, M. Iglesias, D. Baldomir, K. Schwarz, M. Pereiro, J. Botana and J.E. Arias, "Bandstructure study of magnetic and orbital order in BaCoO₃", J. Magn. Magn. Mater. 290-291, 349 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Koji S. Nakayama, M. M. G. Alemany, Tomoko Sugano, Kenji Ohmori, H. Kwak, James R. Chelikowsky and J. H. Weaver. "Electronic structure of Si₁₁001...-c₁₁4Å²... analyzed by scanning tunneling spectroscopy and *ab initio* simulations". Physical Review B (The American Physical Society). Vol. 73, pg. 035330. Available on <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.035330>.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, J Pardo, L. Franco, F. Gómez, A. Iglesias, A. Pazos, J. Pena, R. Lobato, J. Mosquera, M. Pombar and J. Sendón. "Development and operation of a pixel segmented liquid-filled linear array for radiotherapy quality assurance", Phys. Med. Biol. 2005, 50, 1703-16. Available online at <http://www.iop.org/EJ/abstract/-search=11552349.2/0031-9155/50/8/006>

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, H. Gies, J. Sanchez-Guillen and R.A. Vazquez, Quantum effective action from nonperturbative worldline dynamics, JHEP 0508 (2005) 67.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, L. Cazon, R.A. Vazquez y E. Zas, Depth development of extensive air shower from muon time distributions Astroparticle Physics 23 (2005) 393.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Canoa, N. Armesto, C. Pajares y R.A. Vazquez, Collective behaviour in nuclear interactions and shower development Astroparticle Physics 23 (2005) 435.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Carracedo, M. Barreiro, S. Torres, P. Montero, M. Ruiz Villarreal, Marta Gomez, Juan Carlos Carretero & V. Perez-Muñuzuri. "High resolution wave forecasting at Galician coast". Procideengs EUROGOOS 2005.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Gamallo P., Pichel, J.R. (2005) "An Approach to Acquire Word Translations from Non-Parallel Texts", Lecture Notes in Computer Science, vol. 3808, Springer-Verlag, (600-610), ISSN: 0302-9743. Available on <http://gramatica.usc.es/~gamallo/>.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Martinez-Nunez E, Fernandez-Ramos A, Vazquez SA, et al. Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr(CO)₆(⁺) with Xe. J. Chem. Phys. V123, 154311.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Smedarchina Z, Fernandez-Ramos A, Siebrand W, Tunneling dynamics of double proton transfer in formic acid and benzoic acid dimers. J. Chem. Phys. V.122, 134309.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez-Otero, Iván González-López, Angeles Peñaa-Gallego, Jose M. Hermida-Ramón. "A DFT Study of the Pericyclic/Pseudopericyclic Character of Cycloaddition Reactions of Ethylene and Formaldehyde to Buta-1,3-dien-1-one and Derivatives". JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, V. 109, pp. 5636-5644. Data : 2005. ISBN: 1089-5639.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez-Otero, Santiago M. Varela-Varela, Angeles Peña-Gallego, Jose M. Hermida-Ramón. "Are Electrocyclization Reactions of (3Z)-1,3,5-Hexatrienone and Nitrogen Derivatives Pseudopericyclic? A DFT Study". JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, V. 70, pp 3921-3928. Data : 2005. ISBN : 0022-3263.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez-Otero, Rosa M. García-López, Angeles Peña-Gallego, Jose M. Hermida-Ramón. "A Density Functional Theory Study on the Electrocyclization of 1,2,4,6-Heptatetraene Analogues: Converting a Pericyclic to a Pseudopericyclic Reaction". Chemistry-A European Journal, V. 11, pp. 5966-5974. Data : 2005. ISBN : 0947-6539.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Jose M. Hermida-Ramón, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez-Otero. "Theoretical characterization of structures and energies of benzene-(H₂S)_n and (H₂S)_n (n=1-4) clusters". Journal Of Chemical Physics , V. 122, pp 2043151-2043155. Data : 2005. ISBN : 0021-9606

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Angeles Peña-Gallego, Jesús Rodríguez-Otero, Enrique M. Cabaleiro-Lago. "A DFT Study of the Concerted Cyclisation of 3-Azidopropenal to Isoxazole: Is it a Pseudopericyclic Reaction According to Its Magnetic Properties?". European Journal Of Organic Chemistry, V. 2005, pp 3228-3232. Data: 2005. ISBN : 1434-193X.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Emilio Martínez-Núñez, Antonio Fernández-Ramos, and Saulo A. Vázquez, Jorge M. C. Marques, Mingying Xue and William L. Hase, "Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr, CO...6+with Xe", Journal of Chemical Physics 123, 154311/1-154311/9 (2005).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Emilio Martínez-Núñez, Saulo A. Vázquez, F. Javier Aoiz, and Jesus F. Castillo. Quasiclassical Trajectory Study of the Collision-Induced Dissociation Dynamics of Ar + CH₃SH+ Using an Ab Initio Interpolated Potential Energy Surface. J. Phys. Chem. A 110, 1225 (2006).

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Rosa García, Jose M. Seco, Saulo A. Vázquez, Emilio Quiñoa and Ricardo Riguera, Role of Barium(II) in the Determination of the Absolute Configuration of Chiral Amines by 1H NMR Spectroscopy. J. Org. Chem.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Emilio Martínez-Núñez and Saulo Vázquez. Quasiclassical trajectory calculations on the photodissociation of CF₂CHCl at 193 nm: Product energy distributions for the HF and HCl eliminations. J. Chem. Phys.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Navarro-Vázquez, A.; Schreiner P. 1,2-Didehydro[10]annulenes: Structures, Aromaticity and Cyclizations. J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 6150-6159. Available on <http://dx.doi.org/10.1021/ja0507968>.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Alonso-Gómez, J. L.; Pazos, Y.; Navarro-Vázquez, A.; Lugtenburg, J.; Cid, M. M. "Preparation of 13C₄-6-Methyl Anthranilic Ester via a Diels-Alder-Type Process. An experimental and Theoretical Study to characterize an unexpected Isotope Exchange". Org. Lett. 2005, 7, 3773-3776. Available on http://pubs3.acs.org/acs/journals/doi/lookup?in_doi=10.1021/ol051433f

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Leiro, V.; Freire F.; Quiñoá, E.; Riguera, R., "Absolute configuration of amino alcohols by 1H-NMR." Chem. Commun., 2005. 44, 5554-5556.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Freire F.; Seco, J. M.; Quiñoá, E.; Riguera, R., Determining the Absolute Stereochemistry of Secondary/Secondary Diols by 1H NMR. Basis and Applications." J. Org. Chem. 2005, 70 (10), 3778-3790.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Freire F.; Seco, J. M.; Quiñoá, E.; Riguera, R., "The assignment of the absolute configuration and the identification of the pro R and Pro S methylene protons in 1,2-diols by low temperature NMR of a single derivative." *Org. Lett.* 2005. 7 (22), 4855-4858.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Freire F.; Seco, J. M.; Quiñoá, E.; Riguera, R., "The prediction of the Absolute Stereochemistry of primary/Secondary Diols by ¹H NMR: Principles and Application." *Chemistry A European Journal.* 2005,11 (19), 5509-5522.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Moises Gulías, Rebeca García, Alejandro Delgado, Luis Castedo, and Jose L Mascareñas. "Palladium-Catalyzed [3 + 2] Intramolecular Cycloaddition of Alk-5-enylidenecyclopropanes". *JACS* 2006, Vol 128 Num 2, pp 384-385.

- USC, ARTIGO, PUBLICADO, Moises Gulías, Rebeca García, Alejandro Delgado, Luis Castedo, and Jose L Mascareñas. "Palladium-Catalyzed [3 + 2] Intramolecular Cycloaddition of Alk-5-enylidenecyclopropanes". *JACS* 2006, Vol 128 Num 2, pp 384-385.

- USC, ARTIGO, IN PRESS, V. Pardo, D. Baldomir, J. Rivas, J. Castro and J.E. Arias, "Orbital and magnetic structure of quasi-1D cobaltites: ab initio calculations and experiment", , aceptado para su publicación en *J. Magn. Magn. Mater.* (2006).

- USC, ARTIGO, IN PRESS, V. Pardo, P. Blaha, K. Schwarz and D. Baldomir, "Possible non-collinear magnetic configurations in BaCoO₃", , aceptado para su publicación en *Phys. B* (2006).

- USC, ARTIGO, IN PRESS, Monte Carlo correction factors for a Farmer 0.6 cm³ ion chamber dose measurement in the build up of the 6 MV clinical beam. Aceptado para publicación en *Physics in Medicine and Biology*.

- USC, ARTIGO, IN PRESS, Emilio Martínez-Núñez, Antonio Fernández-Ramos, and Saulo A. Vázquez, Jorge M. C. Marques, Mingying Xue and William L. Hase., Quasiclassical dynamics simulation of the collision-induced dissociation of Cr(CO)₆⁺ with Xe. *J. Chem. Phys.*

- USC, ARTIGO, IN PRESS, Michael Harmata, Pinguan Zheng, Peter R. Schreiner and Armando Navarro-Vázquez. Deantiaromatization as a Driving Force in an Electrocyclic Reaction. Accepted for publication in *Angewandte Chemie*.

- USC, ARTIGO, IN PRESS, García, R.; Seco, J. M.; Vázquez, S. A.; Quiñoá, E.; Riguera, Role of Barium (II) in the Determination of the Absolute Configuration of Chiral Amines by ¹H NMR Spectroscopy. *R. J. Org. Chem.* 2005, 70 (10), 3778-3790.

- USC, ARTIGO, IN PRESS, García, R.; Seco, J. M.; Vázquez, S. A.; Quiñoá, E.; Riguera, Role of Barium (II) in the Determination of the Absolute Configuration of Chiral Amines by ¹H NMR Spectroscopy. *R. J. Org. Chem.* 2005, 70 (10), 3778-3790.

- USC, CAPÍTULO, ENVIADO, Dinani Gomes, M. Fernandez-Delgado and S. Barro. "Internal Categories with Irregular Geometry and Overlapping in ART Networks". Enviado a *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, capítulos seleccionados de congreso CAEPIA'05.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, D. Gomes, M. Fernández-Delgado and S. Barro, "Polytope ARTMAP: pattern classification without vigilance based on general geometry categories". Enviado a revista internacional *IEEE Transactions on Neural Networks*.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, V. Pardo and D. Baldomir, "First principles study of the spin state transitions in GdBaCo₂O_{5.5}", enviado a *Phys. Rev. B* en octubre de 2005, reenviado con respuestas al referece en enero de 2006.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. Botana, M. Pereiro, D. Baldomir, H. Kobayashi, J. E. Arias. Magnetic and electronic structure of nFe/3Cr/nFe (n=1->5) trilayers through ab initio calculations. Enviado a Physical Review B o 16 de Xaneiro de 2005.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. Botana, M. Pereiro, D. Baldomir, H. Kobayashi, J. E. Arias. Magnetic and electronic structure of nFe/3Cr/nFe (n=1->5) trilayers through ab initio calculations. Enviado a Physical Review B o 16 de Xaneiro de 2005.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, M.M.G. Alemany and James R. Chelikowsky. "Ab Initio Calculations for the interconversion of optically active defects in amorphous silica". Physical Review B (The American Physical Society).

- USC, ARTIGO, ENVIADO, Pardo J, Roselló J V, Sanchez-Doblado F and Gómez F 2005 Verification of intensity modulated profiles using a pixel segmented liquid-filled linear array, enviado a Phys. Med. Biol. en Septiembre 2005.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. Alvarez Muñiz, E. Marques, R. A. Vazquez, y E. Zas, Coherent radio pulses from showers in different media: An unified parameterization astro-ph/0512337. Available on <http://xxx.unizar.s/abs/astro-ph?papernum=0512337>.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, B. Hervella, C. F. Balseiro and V. Pérez-Muñuzuri. "How to improve heavy rainfall events simulations with increasing resolution? An answer from a convective parameterization scheme perspective". Enviado a Natural Hazards and Earth System Sciences (NHES)

- USC, ARTIGO, ENVIADO, Muñiz Castiñeira, M^a del Carmen. "A FEM/BEM for axisymmetric electromagnetic and thermal modelling of induction furnaces".

- USC, ARTIGO, ENVIADO, Vilella E, Costas J, Sanjuan J, Guitart M, De Diego Y, Carracedo A, Martorell L, Valero S, Labad LA, De Frutos R, Nájera C, Moltó MD, Toirac I, Guillamat R, Brunet A, Vallés V, Pérez L, Leon M, Rodríguez de Fonseca F, Philips C, Torres M and the Spanish network on genotyping and psychiatric genetics. "A case-control study with the schizophrenia candidate genes D-amino acid oxidase, D-amino acid oxidase activator, dysbindin, neuregulin 1 and regulator of G-protein signaling 4 and lack of genetic interaction between them". Journal: Schizophrenia Research.

- USC, ARTIGO, ENVIADO, C. R. Munteanu, B. Fernández., "Accurate intermolecular ground state potential energy surfaces of the HCCH-He, Ne, Ar van der Waals complexes", J. Chem. Phys, aceptado (2005).

- USC, ARTIGO, ENVIADO, A. Rizzo, D. Marchesan, S. Coriani, J. López Cacheiro, B. Fernández, C. Hättig, "Pressure dependence of electric properties of binary mixtures of inert gases", Mol. Phys, aceptado (2005).

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. L. Cagide Fajín, B. Fernández, P. Felker, "The Paradifluorobenzene-Argon Ground State Intermolecular Potential Energy Surface", J. Phys. Chem., aceptado (2005).

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. L. Cagide Fajín, B. Fernández, "Accurate intermolecular ground state potential of the He-HCl van der Waals complex", Chem. Phys. Lett., aceptado (2005).

- USC, ARTIGO, ENVIADO, J. L. Cagide Fajín, B. Fernández, A. Mikosz, D. Farrelly, "Accurate computations of the rovibrational spectrum of the He-HF van der Waals complex", Mol. Phys., aceptado (2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A.J.García Loureiro and J.M.López González. 3D parallel simulation of InP/InGaAs HBT. Conferencia de Dispositivos Semiconductores. Tarragona (2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Diego Rodríguez Martínez, Julio López Albín, José Carlos Cabaleiro, Tomás Fernández Pena, Franciso Fernández Rivera. "A Load Balance Methodology for Highly Compute-Intensive Applications on Grids Based on Computational Modeling". So Grid Computing And Its Application To Data Analysis (Gada'05). 2005 FEDERATED CONFERENCES AND WORKSHOPS. Agia Napa (Cyprus). Grid Computing and its Application to Data Analysis (GADA'05).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Julio López Albín, Diego Rodríguez Martínez, Marcos Boullón, José Carlos Cabaleiro, Tomás Fernández Pena, Franciso Fernández Rivera. "Predicción del rendimiento de una aplicación Grid para el control de inundaciones". XVI Jornadas de Paralelismo. Granada, 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M.Aldegunde, J.J.Pombo and A.J.García Loureiro. "Octree-based Mesh Generation for the Simulation of Semiconductor Devices". Congreso: XX Conference on Design of Circuits and Integrated Systems (DCIS 2005). Lisboa (Portugal), Noviembre (2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, D. Gomes, M. Fernández-Delgado and S. Barro. "A vigilance-free ART network with general geometry internal categories". Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks, Montreal, Canada, July 31 - August 4, 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, D. Gomes, M. Fernández-Delgado y S. Barro. "Categorías internas con geometrías irregulares y superposición en redes ART".

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, N.Seoane, A.J.García Loureiro, K. Kalna y A.Asenov. Discrete doping fluctuations in the delta layer of a 50nm InP HEMT. 15th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices. Pisa (Italia), Julio (2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, N. Seoane, A.J.García Loureiro, K. Kalna y A.Asenov. A high-performance parallel device simulator for high electron mobility transistors. Parallel Computing (ParCo2005). Malaga, Septiembre (2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, K. Warda, L. Wojtczak, D. Baldomir, M. Pereiro, J. Arias. The european conference Physics of Magnetism'05, Polonia, 24/06/2005 a 27/06/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, K. Warda, L. Wojtczak, D.Baldomir, M. Pereiro, J. Arias, New materials for magnetoelectronics, Polonia, 02/05/2005 a 06/05/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Marcos Boullón, José Carlos Cabaleiro, Ramón Doallo, Patricia González, Diego Rodríguez Martínez, Maria Martín, José Carlos Mouriño, Tomás Fernández Pena, Franciso Fernández Rivera. "Modeling execution time of selected computation and communication kernels on Grid". European Grid Conference, 2005. Amsterdam (The Netherlands). European Grid Conference (EGC2005).

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J. Pardo, L. Franco, F. Gómez, A. Iglesias, A. Pazos, J. Pena, M. Zapata, M. Pombar, R. Lobato, J. Mosquera, J. Sendón, Diseño y primeras pruebas de un detector lineal de 128 píxeles de isoctano líquido para control de calidad en radioterapia, XV Congreso Nacional de Física Médica, Pamplona, Julio 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, F. Martín, I. Palomino, A. Guerra, M.J. Souto, C. F. Balseiro, E. Penabad, V. Pérez-Muñuzuri, A. Redaño, D. Gomis. "A modelling system to forecast atmospheric PM concentrations in spanish ports". 1st International Conference "Harbours and Air Quality", Genova, Junio 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, S. Saavedra, E. Penabad, J.A. Souto, "testing of local turbulence closures in mesoscale model to be applied in the saga decision support system". Congreso: "Atmospheric Sciences and Air Quality Conference", San Francisco, 2005. Available on <http://www.ametsoc.org/meet/fainst/asaa.html>

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Fernández, B. "Accurate Rovibrational Spectra of van der Waals Complexes". Congreso: Modelling Structure and Reactivity, WATOC – 05. Cape Town (Sudáfrica), 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J. Rodríguez-Otero, E. Cabaleiro-Lago, M. Montero-Campillo y Á. Peña-Gallego. "Estudio teórico de la cicloadición [2 + 2 + 2] de 1,6-dianos con compuestos tricarbónicos catalizada por rutenio (II). Congreso : XXX bienal de la RSEQ. Lugar de celebración : Lugo (España). Data : do 19/09/2005 ó 23/09/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Á. Peña-Gallego, E. Cabaleiro-Lago, M. Montero-Campillo y J. Rodríguez-Otero. "Estudio teórico comparativo del carácter pseudopericíclico-pericíclico en una serie de electrociclaciones de dienilcetenas a ciclohexadienonas". Congreso : XXX bienal de la RSEQ. Lugar de celebración : Lugo (España). Data : do 19/09/2005 ó 23/09/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, E. M. Cabaleiro-Lago, M. Montero-Campillo, Á. Peña-Gallego y J. Rodríguez-Otero. "Estudio computacional de la interacción en complejos fenol (CH₃X)_n; (x=CN, Cl, F; n=1, 2). Congreso : XXX bienal de la RSEQ. Lugar de celebración : Lugo (España). Data : do 19/09/2005 ó 23/09/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. M. Montero-Campillo, J. Rodríguez-Otero, E. M. Cabaleiro-Lago y Á. Peña-Gallego. "Estudio teórico de reacciones pericíclicas catalizadas por litio". Congreso : XXX bienal de la RSEQ. Lugar de celebración : Lugo (España). Data : do 19/09/2005 ó 23/09/2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Garcia-Fandino, Rebeca; Gulías, M; Mascareñas, J.L.; Castedo, L.; Granja, J. R "Palladium-catalyzed [3+2] intramolecular cycloaddition of alkenes and alkynes to methylenecyclopropanes". Oral presentation, Book of Abstracts ESOR 10, page 88. 10th ESOR, Rome, July 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Seijas, J. A.; Vázquez-Tato, M. P.; Carballido-Reboredo, M. R.; Vázquez-Santos, M. B., "Cálculo de espectros UV-Vis de 5,7-dihidroxi flavonas. Efectos de la solvatación." Comunicacion GI-F-CP94. Congreso: XXX Reunión bienal de la RSEQ. Septiembre 2005.

- USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Garcia-Fandino, Rebeca; Aldegunde, M. J.; Castedo, L.; Granja, J. R. "Síntesis de taxoesteroides mediante metátesis de dieninos." Poster presentation. Book of Abstracts, S1PO97, page 169. XXX Reunión Bienal de la RSEQ, Lugo, September 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, J.J.Pombo, M.Aldegunde and A.J.García Loureiro. "Optimization of an Octree-based 3-D Parallel Meshing Algorithm for the Simulation of Small-Feature Semiconductor Devices". Parallel Computing (ParCo2005). Málaga, Septiembre (2005).

- USC, CONGRESO, PÓSTER, V. Pardo, J. Rivas, D. Baldomir, P. Blaha, M. Iglesias, K. Scwarz and J.E. Arias, "Magnetic clusters in the series Sr_xBa_{1-x}CoO₃ described using WIEN2k", , presentado en el XX Plannealm Workshop on Novel Materials and Superconductors, Plannealm (Austria), 12-19 Febrero de 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, V. Pardo, P. Blaha, K. Schwarz and D. Baldomir, "Possible non-collinear magnetic configurations in BaCoO₃", presentado en el "Interantional Conference on Strongly Correlated Electron Systems, SCES '05", Viena (Austria), 26-30 de julio de 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, J. Pardo, J. V. Roselló, F. Sánchez-Doblado, F. Gómez, IMRT treatments and MLC leaf displacements verification with a liquid-filled linear array, 8th Biennial ESTRO meeting on physics and radiation technology for clinical radiotherapy, Lisboa (Portugal), Septiembre 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, Upgrading of CAVRZnrc ionization chamber simulation code for accurate IMRT verification. 8th Biennial ESTRO meeting on physics and radiation technology for clinical radiotherapy. Lisboa (Portugal).

- USC, CONGRESO, PÓSTER, J. L. Cagide Fajín, B. Fernández, J. López Cacheiro, J. Makarewicz, C. R. Munteanu. "Accurate Intermolecular ground state potentials of van der Waals Complexes". Congreso: Computational tools for Molecules, Clusters and Nanostructures. Karlsruhe (Alemania), 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, F. S. Sussman, L. González, J. M. Otero, M. C. Villaverde, J. C. Estévez y R. J. Estévez. "Search for optimal isosteres in beta-secretase peptidic inhibitors". Congreso: 30th FEBS Congress and 9th IUBMB Conference. Publicación: The FEBS Journal, volumen 272, página 147 (2005). Lugar de celebración: Budapest (Hungria), julio 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, L. González-Louro, J. M. Otero, M. A. Castro, F. Sussman, M. C. Villaverde, J. C. Estévez y R. J. Estévez. "Búsqueda de isómeros óptimos para inhibidores de la β -secretasa". Congreso: XXX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Publicación: Libro de Resúmenes. Lugar de celebración: Lugo, septiembre 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, J. M. Otero, J. C. Estévez, F. Sussman, M. C. Villaverde y R. J. Estévez. "Homopolímeros de β -aminoácidos ciclohexánicos derivados de azúcares". Publicación: Libro de Resúmenes. Congreso: XXX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Lugar de celebración: Lugo, septiembre 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, F. Fernández, J. M. Otero, J. C. Estévez, F. Sussman, M. C. Villaverde y R. J. Estévez. "Homopolímeros de β -aminoácidos ciclopentánicos derivados de azúcares". Publicación: Libro de Resúmenes. Congreso: XXX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Lugar de celebración: Lugo, septiembre 2005.

- USC, CONGRESO, PÓSTER, Garcia-Fandino, Rebeca; Gulías, M; Mascareñas, J.L.; Castedo, L.; Granja, J. R "Palladium-catalyzed [3+2] intramolecular cycloaddition of alkenes and alkynes to methylenecyclopropanes" . Oral presentation, Book of Abstracts ESOR 10, page 88. 10th ESOR, Rome, July 2005.

- USC, TESE, DEFENDIDA, Cristian Robert Munteanu, Achúrate intermolecular ground state potentials of van der Waals complexes. Directora: Berta Fernández. Apto "cum laude". 15/08/02-11/11/05

- USC, TESE, DEFENDIDA, Determinación de la configuración absoluta de dioles y trioles mediante RMN de ¹H.

- USC, TESE, EN PROCESO, Tese de Rebeca García Fandiño.

- USC, TESE, EN PROCESO, Tese de Roberto Brea Fernández.

- USC, TESE, EN PROCESO, Aldegunde Rodríguez, M.A, "Implementación de un simulado 3D paralelo para el estudio de dispositivos MOSFET". Director de tese Antonio J. García Loureiro.

- USC, TESE, EN PROCESO, Pardines Lence, Inmaculada, "Paralelización de códigos de optimización sobre sistemas de memoria distribuida. Director: Francisco Fernández Rivera.

- USC, TESE, EN PROCESO, Pichel Campos, Juan. "Optimization of the memory hierarchy in irregular problems". Director: Francisco Fernández Rivera.

- USC, TESE, EN PROCESO, Pombo García, J. José, "Generación automática de mallas para problemas de elementos finitos en sistemas multiprocesador". Director: Tomás Pena e José Carlos Cabaleiro.

- USC, TESE, EN PROCESO, Boullón Magán, M., "Una metodología para la modelización de comunicaciones MPI en clusters y grids". Director: Francisco Fernández Rivera.

- USC, TESE, EN PROCESO, Seoane Iglesias, N. "Estudio de fluctuaciones y variaciones materiales en dispositivos HEMT". Director: Antonio J. García Loureiro.

- USC, TESINA, DEFENDIDA, Diego Rodríguez Martínez. "Modelización e mellora do comportamento computacional na simulación paralela da dispersión atmosférica de contaminantes", 2005.

- USC, TESINA, DEFENDIDA, Determinación de la configuración absoluta de 1,2,3-trioles quirales en beta y gamma: Bases y aplicaciones.

- USC, TESINA, DEFENDIDA, Aldegunde Rodríguez, M.A, "Técnicas de generación de mallas de elementos finitos adaptadas a la simulación de dispositivos semiconductores". Director da Tesina Antonio J. García Loureiro.

- USC, PROXECTO, DEFENDIDO, Jose Angel del Rio Loureda, "Estudio teórico de la interacción entre pinzas moleculares y bencenos sustituidos". Universidade : Universidade de Santiago de Compostela. Facultade/Escola : Fac. de Ciencias. Data : 2005.

- USC, EMPRESA: Consellería de Medio Ambiente - Xunta de Galicia y USC. Mellora dos modelos meteorolóxicos e oceanográficos aplicados a Galicia.

- USC, EMPRESA: Endesa, "Análisis de escenarios de calidad de aire en Galicia".

Producción científica declarada por grupos de traballo da Universidade de Vigo - UVIGO

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, D. Gonzalez-Salgado, I. Nezbeda. "Excess properties of aqueous mixtures of methanol: Simulation versus experiment" Fluid Phase Equilibria 240 (2006) 161-166.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Oreiro, R., Pérez Hernández, F., Ulla, A., Garrido, R., Ostensen, R. & MacDonald. "Balloon090100001: a short and long period pulsating sdB star" J., 2005, A&A, 438, 257.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, M. C. Fernández-Alonso, J. Cañada, J. Jiménez-Barbero, G. Cuevas, "Molecular Recognition of Saccharides by Proteins. Insights on the Origin of the Carbohydrate-Aromatic Interactions". JACS, 2005, 127, 7379-7386.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Ana M. Graña, José M. Hermida-Ramón, Ricardo A. Mosquera. "QTAIM interpretation of the basicity of substituted anilines". Chemical Physics Letters 412 (2005) 106-109.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Marcos Mandado, Ricardo A. Mosquera, Ana M. Graña and Christian Van Alsenoy. "Charge density analysis of some processes involving intramolecular hydrogen transfer". *Tetrahedron* 61 (2005) 819–829.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, G. Cuevas, K. Martínez-Mayorga, M. C. Fernández-Alonso, J. Jiménez-Barbero, C. Perrin, E. Juaristi, N. López-Mora. "The origin of One-Bond C-H Coupling Constants in O-C-H Fragment: Not primarily nO→ σ*CH Delocalization". *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2005, 44, 2360-2364.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, M. C. Fernández-Alonso, J. Cañada, J. Jiménez-Barbero, G. Cuevas. "Theoretical study of inversion and topomerization processes of substituted cyclohexanes: The relevance of the energy 3D hypersurface". *ChemPhysChem*, 2005, 6, 671-680.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Cabaleiro-Lago EM, Rodriguez-Otero J, Garcia-Lopez RM, Penha-Gallego A, Hermida-Ramon JM. "A density functional theory study on the electrocyclicization of 1,2,4,6-heptatetraene analogues: Converting a pericyclic to a pseudopericyclic reaction". *Chemistry-A European Journal* 11 (20): 5966-5974 OCT 7 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Grana AM, Hermida-Ramon JM, Mosquera RA. "QTAIM interpretation of the basicity of substituted anilines". *Chemical Physics Letters* 412 (1-3): 106-109 AUG 25 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Cabaleiro-Lago EM, Rodriguez-Otero J, Gonzalez-Lopez I, Penha-Gallego A, Hermida-Ramon JM. "A DFT study of the pericyclic/pseudopericyclic character of cycloaddition reactions of ethylene and formaldehyde to buta-1,3-dien-1-one and derivatives". *Journal Of Physical Chemistry A* 109 (25): 5636-5644 JUN 30 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Hermida-Ramon JM, Cabaleiro-Lago EM, Rodriguez-Otero J. "Theoretical characterization of structures and energies of benzene-(H-2(n)S) (and (H)(S))(2)(n) (n=1-4) clusters". *Journal Of Chemical Physics* 122 (20): Art. No. 204315 MAY 22 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Cabaleiro-Lago EM, Rodriguez-Otero J, Varela-Varela SM, Penha-Gallego A, Hermida-Ramon JM. "Are electrocyclization reactions of (3Z)-1,3,5-hexatrienone and nitrogen derivatives pseudopericyclic? A DFT study". *Journal Of Organic Chemistry* 70 (10): 3921-3928 May 13 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Vivian Pogenberg, Jean-François Guichou‡, Valérie Vivat-Hannah, Sabrina Kammerer, Efrén Pérez, Pierre Germain, Angel R. de Lera, Hinrich Gronemeyer, Catherine A. Royer, and William Bourguet. "Characterization of the Interaction between Retinoic Acid Receptor/Retinoid X Receptor (RAR/RXR) Heterodimers and Transcriptional Coactivators through Structural and Fluorescence Anisotropy Studies". *The Journal Of Biological Chemistry* Vol. 280, No. 2, pp. 1625–1633, 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Silva Lopez, C., Nieto Faza, O, Lopez, S., de Lera, A.R. "Computation of vertical excitation energies of retinal and analogs: scope and limitations". *J. Comp. Chem.*, 27:116, 2005.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Rosana Álvarez, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López and Ángel R. de Lera. "Computational characterization of a complete palladium-catalyzed cross-coupling process: The associative transmetalation in the Stille reaction". *Organic Letters* 8 (1), pp. 35-38. Available online at http://pubs3.acs.org/acs/journals/doi/lookup?in_doi=10.1021/ol052398f

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Susana López, Virginia Rodríguez, Javier Montenegro, Carlos Saá, Rosana Alvarez, Carlos Silva López, Angel R. de Lera, Rosana Simón, Tzvetana Lazarova, Esteve

Padrós. "Synthesis of N-Heteroaryl Retinals and their Artificial Bacteriorhodopsins". *ChemBioChem* 6 (11), pp. 2078-2087. Available online at <http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/112125793/ABSTRACT>

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, Rosana Álvarez and Ángel R. De Lera. "Mechanistic subtleties in the cyclopentannulation of allenolate allyl carbamates: The origin of the center-to-center chirality transfer". *Chemical Communications* (34), pp. 4285-4287. Available online at <http://www.rsc.org/publishing/journals/CC/article.asp?doi=b506601h>

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Carlos Silva López, Rosana Álvarez, Olalla Nieto Faza and Angel R. De Lera. "Simple diastereoselectivity of the BF₃-OEt 2-catalyzed vinylogous Mukaiyama aldol reaction of 2-(trimethylsiloxy)furans with aldehydes". *Journal of Organic Chemistry* 70 (9), pp. 3654-3659. Available online at http://pubs3.acs.org/acs/journals/doilookup?in_doi=10.1021/jo0501339

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Souto, J; Silva, Carlos; Nieto, Olalla; Álvarez, Rosana and R. De Lera, Ángel, "2-Alkylidenesulfol-3-enes by (regio- and) stereoselective cheletropic addition of SO₂ to (di)vinyllallenes". *Organic Letters* 7 (8), pp. 1565-1568. Available online at http://pubs3.acs.org/acs/journals/doilookup?in_doi=10.1021/ol050240p

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, Silva López, C., Nieto Faza, O., Cossio, F., York, D. And R. De Lera, A. "Ellipticity: A convenient tool to characterize electrocyclic reactions". *Chemistry - A European Journal* 11 (6), pp. 1734-1738. Available online at <http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/109876179/ABSTRACT>

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, A. Vila, R. A. Mosquera. "Quantum theory of atoms in molecules analysis on the conformational preferences of vinyl alcohol and related ethers". *J. Phys. Chem. A* 109 (205) 6985-6989.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, A. Vila, E. de la Puente, R. A. Mosquera, "QTAIM study of the electronic structure and strain energy of fluorine substituted oxiranes and thiiranes". *Chem. Phys. Lett.* 405(2005) 440-447.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, J.R. Flores. "A theoretical study of the excited electronic states of the SiCN system". *Chemical Physics* 310 (2005) 303-310. Available online at www.sciencedirect.com.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, J.R. Flores, I. Pérez-Juste, L. Carballeira. "A theoretical study of the SiCNH isomers". *Chemical Physics* 313 (2005) 1-15. Available online at www.sciencedirect.com.

- UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, J.R. Flores y R. Gdanitz. "Accurately solving the electronic Schrodinger equation of small atoms and molecules using explicitly correlated (r12-)MR-CI. VIII. Valence excited states of methylene (CH₂)". *Journal of Chemical Physics* 123(14), (2005), 144316-144318.

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, D. Bessières, S.L. Randzio, Th. Lafitte, M.M. Piñeiro, and J-L. Daridon, "A combined pressure-controlled scanning calorimetry and Monte Carlo determination of the Joule-Thomson inversion curve. Application to methane" *Revista: Journal of Physical Chemistry B* (aceptado para publicación).

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, J. Jiménez-Barbero, J. L. Asensio, G. Cuevas, A. Canales, M. C. Fernández-Alonso, F. J. Cañada. "Conformational Insights on the Molecular Recognition Processes of Carbohydrate Molecules by Proteins and Enzymes. A 3D View by Using NMR". *Biocatal. Biotransform.*, 2005.

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, Nieto Faza, O, Silva Lopez, C., Alvarez, R. , de Lera, A. R. "The mechanism of the gold(I) catalyzed Rautenstrauch rearrangement: a center-to-helix-to-center chirality transfer". J. Am. Chem. Soc. (2005).

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, K. Jankowski, R. Slupski, J.R. Flores. "Towards benchmark second-order correlation energies for large atoms II: Angular extrapolation problems". Molecular Physics.

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, J.R. Flores, R. Slupski, K. Jankowski. "Towards benchmark second-order correlation energies for large atoms. II. Angular extrapolation problems". Journal of Chemical Physics.

- UVIGO, ARTIGO, IN PRESS, K. Jankowski, R. Slupski, J.R. Flores. "Ab initio asymptotic-expansion coefficients for pair energies in MP2 perturbation theory for atoms". Molecular Physics.

- UVIGO, CAPÍTULO, IN PRESS, J. Jiménez-Barbero, J. Cañada, J. L. Asensio, G. Cuevas, M. C. Fernández-Alonso, N. Aboitiz, Á. Canales, S. Mari, I. Chávez, P. Vidal, "Protein-Carbohydrate interactions: A combined theoretical and experimental approach on carbohydrate-aromatic interactions and on pyranose ring distortion". Am. Chem. Soc.; Symp. Ser., 2005.

- UVIGO, ARTIGO, ENVIADO, I. García-Tuñón, J. M. Taboada, J. L. Rodríguez, F. Obelleiro, and L. Landesa, "Efficient Asymptotic-Phase Modeling of the Induced Currents in the Fast Multipole Method", enviado para publicación a la revista Microwave and optical technology letters.

- UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, D. González-Salgado, L. Vlcek, I. Nezbeda. "Excess properties of aqueous mixtures of methanol: Realistic and primitive models". Thermodynamics 2005. Sesimbra (Portugal).

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, M. M. Piñeiro, M. Medeiros, C. Cerdeiriña, J. L. Legido. Estimation of second derivative properties of methane and ethane close to the critical point using NPT Monte Carlo. Congreso: 6th Liquid Matter Conference. Publicación: Libro de resúmenes. Lugar de celebración: Utrecht (Holanda). Fecha: 2-6 de julio de 2005.

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, S. E. Quiñones-Cisneros, M. M. Piñeiro, G. Galliero, C. Boned. A friction theory viscosity model for the Lennard Jones fluid. Congreso: Thermodynamics 2005. Publicación: Libro de resúmenes. Lugar de celebración: Sesimbra, (Portugal). Fecha: 6 al 8 de Abril de 2005.

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, S. E. Quiñones-Cisneros, M. M. Piñeiro, U. Deiters. A Lennard Jones van der Waals type equation of state. Tipo de participación: Oral. Congreso: Thermodynamics 2005. Publicación: Libro de resúmenes. Lugar de celebración: Sesimbra, (Portugal). Fecha: 6 a 18 de Abril de 2005.

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, M. E. Vazquez Mendez, M. A. Vilar. Optimal shape design for fishways in rivers. Third IMACS Conference on Math. Model. and Comput. Meth. in Appl. Sci. and Eng. (Modelling 2005), Pilsen (Republica Checa), 2005.

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, R. Muñoz Sola, C. Rodriguez, M. E. Vazquez Mendez. Optimal purification in a polluted shallow water area. 22nd IFIP TC7 Conference on System Modelling and Optimization, Turin (Italia), 2005.

- UVIGO, CONGRESO, PÓSTER, Congreso: Euromar EENC 2005. Lugar de celebración: Veldhoven (The Netherlands), 3-8 Julio, 2005.

- UVIGO, TESE, DEFENDIDA, Interacciones proteína-carbohidrato: estudio teórico de los requisitos energéticos para la distorsión de anillos de piranosa y origen de las interacciones carbohidrato-anillo aromático.

- UVIGO, TESE, DEFENDIDA, Nieto, O. “Estudio computacional de reacciones electrocíclicas en sistemas cargados: estereoselectividad y mecanismo”.

- UVIGO, TESE, EN PROCESO, R. Oreiro: “Subenanas calientes: análisis sismológico”.

- UVIGO, OUTROS, PUBLICADO, Francisco Javier Fernandez Fernandez. Trabajo de investigacion tutelado: Aportaciones al estudio y resolucion numerica de problemas de control óptimo relacionados con algunas ecuaciones de la termo-hidraulica.

- UVIGO, EMPRESA: IZAR. Estudio de antenas de HF en el buque BPE.

- UVIGO, EMPRESA: Jefatura de Apoyo Logístico (JAL) de la Armada. Estudio de Compatibilidad Electromagnética del sistema LINK-16 en el buque Castilla.

- UVIGO, EMPRESA: Construcciones Aeronáuticas S.A. (C.A.S.A). Estudio de EMC en antenas de helicópteros de la Armada Española.