

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DECLARADA POLOS USUARIOS 2004

O presente informe inclúe a produción científica correspondente ao ano 2004 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	USC	UDC	UVIGO	CSIC	TOTAL
Artigos Científicos	54	13	27	43	134*
Aceptados	7	1	4	8	20
Enviados	11	5	3	7	26
Publicados	36	7	20	28	91
Presentacións en Conferencias/Congresos	45	5	18	20	72*
Presentacións	32	2	11	8	53
Posters	13	3	7	12	35
Teses Doutorais	17	9	3	3	32
En proceso	15	7	3	2	27
Defendidas	2	2	0	1	5
Teses Licenciatura/Proxectos Fin Carreira	6	5	1	0	12
En proceso	4	2	0	0	7
Defendidas	2	3	0	0	5
Outros	2	1	0	3	6
TOTAL POR INSTITUCIÓN	124	33	49	69	256

PORCENTAXE DE USUARIOS QUE DECLARAN PRODUCCIÓN 78,57 %
 PORCENTAXE DE HORAS CONSUMIDAS POR ESTES 90,01%

* 8 PUBLICACIÓN E 16 CONGRESOS ASINADOS POR MÁIS DUNHA INSTITUCIÓN

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

PRODUTO	2002	2003	2004
Artigos Científicos	93	107	134*
Aceptados	4	8	20
Enviados	16	29	26
Publicados	73	70	91
Presentacións en Conferencias/Congresos	42	52	72*
Presentacións	33	40	53
Posters	9	12	35
Teses Doutorais	17	21	32
En proceso	8	17	27
Defendidas	9	4	5
Teses Licenciatura/Proxectos Fin Carreira	12	9	12
En proceso	6	5	7
Defendidas	6	4	5
Outros	5	5	6
TOTAL	169	194	256

* 8 PUBLICACIÓN E 16 CONGRESOS ASINADOS POR MÁIS DUNHA INSTITUCIÓN

Producción científica declarada por grupos de trabajo do Consejo Superior de Investigaciones Científicas – CSIC:

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, G. Avila, G. Tejada, J.M. Fernández and S. Montero. The Raman spectra and cross-sections of the ν_2 band of H₂O, D₂O and HDO. In: Journal of Molecular Spectroscopy 223 (2004) 166-180. Available online at www.sciencedirect.com

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, G. Avila, J.M. Fernández, G. Tejada, and S. Montero. The Raman spectra and cross-sections of the ν_2 band of H₂O, D₂O and HDO. In: Journal of Molecular Spectroscopy 228 (2004) 38-65. Available online at www.sciencedirect.com

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, S. Martínez, M. T. Expósito, J. Ramos, V. Cruz, M. C. Martínez, M. López, A. Muñoz-Escalona, J. Martínez Salazar. An Experimental and Computational Evaluation of Ethylene/Styrene Copolymerization with a Homogeneous Single-Site Titanium (IV)-Constrained Geometry Catalyst. In: Journal of Polymer Science. Available online at: www.interscience.wiley.com

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.T. Exposito, S. Martínez, J. Ramos, V. Cruz, M. Lopez, A. Muñoz-Escalona, N. Haider, J. Martínez-Salazar. Ethylene/styrene copolymerisation by homogeneous metallocene catalysts: experimental and molecular simulations using rac-ethylenebis (tetrahydroindenyl) MC12 [M=Ti, Zr] systems. In: Polymer.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, "The Br-O bond in halogen oxides – Empirical force constants and electronic characteristics". Rafael Escribano, Ismael K. Ortega, Rafael G. Mosteo and Pedro C. Gómez.

CSIC-UNIVERSIDAD DE CANTABRIA, ARTIGO, PUBLICADO, "Detection of Non-Gaussianity in the Wilkinson Microwave Anisotropy Probe First-Year Data Using Spherical Wavelets". Patricio Vielva, Enrique Martínez-González, Rita Belen Barreiro, Jose Luis Sanz y Laura Cayón. In: The Astrophysical Journal. Vol.: 609, Issue 1, pp. 22-34. Tomo: 1 Páginas: 22-34

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, D. Lopez-Duran, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek. Raman spectra of (He) N-Br 2(X) clusters: The role of boson/fermion statistics in a quantum solvent. J. Chem. Phys. 121, 2975 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, D. Lopez-Duran, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek, Role of Boson-Fermion Statistics on the Raman Spectra of BR2(X) in Helium Clusters. Phys. Rev. Lett. 93, 053401 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M. Kaczmarek, R. Rurali and E. R. Hernández, Reversible scaling simulations of the melting transition in silicon, Physical Review B 69, 214105 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, R. PROSMITI, S. LÓPEZ-LÓPEZ and A. GARCÍA-VELA, Potential Energy Surface and ro-vibrational states of Ar_HI ground state. In: J. Chem. Phys. , 120, 6471-6477 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, R. PROSMITI, Á. VALDÉS, P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO. Three-Dimensional Ab initio Potential and ground state dynamics of HeI 2 complex. In: J. Phys. Chem. A, 108, 6065-6071 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, S. LÓPEZ-LÓPEZ, R. PROSMITI and A. GARCÍA-VELA, Quantum treatment of the Ar_HI photodissociation dynamics. J. Chem. Phys. , 121, 1802-1809 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Á. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO. HeBr₂ complex: a ground state potential and dynamics from ab initio calculations. In: Mol. Phys. , 102, 2277 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, R. PROSMITI, S. LÓPEZ-LÓPEZ and A. GARCÍA-VELA. Effect of the initial excitation of the intermolecular stretching mode in the Ar-HBr photolysis. Mol. Phys. , 102, 2269 (2004).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ab initio calculations, potential representation and vibrational dynamics of He₂_Br₂ van der Waals complex. In: J. Chem. Phys. , 122, 044305-1-8 (2005).

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Dayou F, Bartolomei M, Campos-Martinez J, Hernandez M. I., Hernandez-Lamonedá R., On the role of the vibrational dependence of the intermolecular potential in O-2(nu)+O-2 collisions MOLECULAR PHYSICS 102 (21-22): 2323-2334 NOV 10 2004.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Hernandez MI, Campos-Martinez J, Van Caillie C, di Domenico D. Wave packet calculations for H-2+H-2 collisions: isotopic substitution effects MOLECULAR PHYSICS 102 (21-22): 2335-2343 NOV 10 2004.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Dayou F, Campos-Martinez J, Hernandez MI, Hernandez-Lamoneda R. Spin-orbit coupling in O-2(v)+O-2 collisions: A new energy transfer mechanism JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 120 (22): 10355-10358 JUN 8 2004.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, S. López-López and Alberto García Vela. Photodissociation Dynamics of the Kr-HBr Cluster: The Effect of the rare Gas Atom Substitution. In: J. Chem. Phys. 120 (2004) 660.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Josep M. Anglada, The Complex Mechanism of the Gas Phase Reaction between Formic Acid and Hydroxyl Radical. Proton Coupled Electron Transfer versus Radical Hydrogen Abstraction Mechanisms. /J. Am. Chem. Soc./, *2004*, /126/, 9809-9820.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, Ibon Alkorta, Oscar Picazo and Jose Elguero Tetrahedron, Chiral discrimination and isomerization processes in monomers, dimers and trimers of sulfoxides and thioperoxides. In: Asymmetry 15 (2004) 13911399.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.A. Montes-Moran, D. Suárez, J.A. Menéndez, E. Fuente. In: Carbon, 2004, 42, 1219-1224.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.V.Roux, M.Temprado, P.Jiménez, J.Z.Dávalos, R.Notario, G.Martín-Valcárcel, L.Garrido, R.Guzmán-Mejía y E.Juaristi, Thermochemistry of 1'3-Dithacyclohexane 1-Oxide (1'3-Dithiane Sulfoxide): Calorimetric and Computational Study. In: J. Org. Chem. 2004, 69, 5454-5459.

CSIC, ARTIGO, PUBLICADO, M.V.Roux, M.Temprado, R.Notario, S.P.Verevkin, V.N.Emel'yanenko, D.E.DeMasters y J.F.Liebman, The energetics of naphthalene derivatives, III: phenylacetic acid and the isomeric 1- and 2- naphthylacetic acids. In: Molec. Phys. 2004, 102, 1909-1917.

USC, ARTIGO, ENVIADO, "Calculations of giant magnetoresistance in Fe/Cr trilayers using layer potentials determined from ab-initio methods". M. Pereiro, D. Baldomir, S. V. Man'kovsky, K. Warda, J.E. Arias, L. Wojtczak and J. Botana. Submitted to: Physical Review B, 2004.

USC, ARTIGO, ENVIADO, "Effects of Sr doping on the magnetic properties of $Sr_xBa_{1-x}CoO_3$ ". V. Pardo, J. Rivas and J. Baldomir. Submitted to Applied Physics Letters

CSIC, ARTIGO, ENVIADO, A. García-Vela, A full-dimensional quantum dynamical approach to the vibrational predissociation of Cl_2-He_2 . In: J. Chem. Phys., 122 (2005), 14312.

CSIC, ARTIGO, ENVIADO, An empirical potential energy surface for the He-Br₂ (B3IIu) Van der Waals Complex. Sent to: J. Chem. Phys.

CSIC, ARTIGO, ENVIADO, 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. Top. Catal. Sometido a publicación.

CSIC, ARTIGO, ENVIADO, C. Di Paola, F. A. Gianturco, D. Lopez-Duran, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, and J. Jellinek, enviado a Chem. Phys. Chem.

CSIC, ARTIGO, ENVIADO, Francisco Corzana, Igor Cuesta, Agatha Bastida, Ana Hidalgo, Monserrat Latorre, Carlos González, Eduardo García Junceda, Jesús Jiménez-Barbero and Juan Luis Asensio. Estudio por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Dinámica Molecular (DM) de la estructura en agua del antibiótico estreptomycin y de su inactivación por la 6-adeniltransferasa. In: Chemistry-An European Journal.

CSIC, ARTIGO, IN PRESS, Karina Martínez-Mayorga, María del Carmen Fernández-Alonso, Charles Perrin, Jesús Jiménez-Barbero, Eusebio Juaristi and Gabriel Cuevas. The role of n₀ C-H Stereoelectronic interactions in the one bond C-H Coupling Constants. The relevance of dipolar interactions. In: Angewandte Chemie.

CSIC, ARTIGO, IN PRESS, María del Carmen Fernández-Alonso, Jesús Jiménez-Barbero, Gabriel Cuevas. Theoretical Study of the Inversion and Topomerization Processes of Substituted Cyclohexanes. The Relevance of energy 3D-hypersurface. In: ChemPhysChem.

CSIC, ARTIGO, IN PRESS, M. Kaczmarek, O. N. Bedoya Martínez and E. R. Hernández, Phase diagram of silicon from atomistic simulations, Physical Review Letters.

CSIC, ARTIGO, IN PRESS, M. Bartolomei, M. I. Hernandez, J. Campos Martinez. "Wave packet dynamics of H-2(v1=8-14)+H-2(v2=0-2): The role of the potential energy surface on different reactive and dissociative processes". In: Journal of Chemical Physics, vol. 122, pp. 1--10 (2005).

CSIC, ARTIGO, IN-PRESS, Oscar Picazo, Ibon Alkorta, Jose Elguero. Dimers of 1,8a-dihydro-1,8-naphthyridine derivatives as models of chiral self-recognition. In: Structural Chemistry, 2005.

CSIC, ARTIGO, IN-PRESS, Oscar Picazo, Ibon Alkorta, Jose Elguero, Otilia Mo, Manuel Yañez. Chiral recognition in phosphinic acid dimers. In: J. Phys. Org. Chem. 2005.

CSIC, ARTIGO, IN-PRESS, M. P. de Lara-Castells, D. Lopez-Duran, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek, Phys. Rev. A.

CSIC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, Á. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILLARREAL, G. DELGADO-BARRIO and H-J. WERNER. Ab initio calculations of potential surface of the B state HeI 2 complex. In: J. Chem. Phys. , to be submitted (2005).

CSIC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, Á. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO. A theoretical study of the He 2ICl van der Waals complex. In: J. Chem. Phys. , en preparación (2005).

CSIC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, M. Martín Pastor, M. A. Canales, Francisco Corzana López, Juan Luis Asensio and J. Jiménez Barbero. Interpretation of Residual Dipolar Couplings in Flexible carbohydrates usig Molecular Dynamics NMR and steric alignment.

CSIC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, Francisco Corzana López and Juan Luis Asensio Álvarez. Estudio por RMN y DM de la estructura del antibiótico Kanamicina en agua..

CSIC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, Francisco Corzana López and Juan Luis Asensio Álvarez. Propiedades estructurales de O-Glicósidos derivados de serina y treonina.

CSIC, CAPÍTULO DE LIBRO, IN-PRESS, Á. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO. Ab initio van der Waals potential energy surfaces. Application to complexes of Br₂ with Helium atoms. In: Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Kluwer series (The Netherlands), in press (2005).

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Interacciones proteína-carbohidrato: estudio teórico de los requisitos energéticos para la distorsión de anillos de piranosa y del origen de las interacciones carbohidrato-anillo aromático. In: XX Reunión Bianual de Química Orgánica. Zaragoza, 9-12 de junio, 2004.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Protein-carbohydrate interaction: theoretical studies on the origin of carbohydrate-aromatic interaction. In: Seminari Chimici.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Protein-carbohydrate interactions: on the origin of carbohydrate-aromatic interactions. Theoretical study of the pyranose ring distortion. In: 2ª Reunión Bial del grupo especializado de RMN de la RSEQ. Santiago de Compostela, septiembre 2004.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Jiménez-Barbero, J; Cañada, J.; Cuevas, G; Fernández-Alonso, M.C.; Asensio, J.L.; Corzana, F. Computational insights on the molecular recognition processes between carbohydrates and proteins: a comparison with NMR experimental observations. In: Abstracts of papers, 227th ACS National Meeting, Anaheim, CA, United States, March 28-April 1, 2004.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. C. Capel-Sanchez, V. A. de la Pena-O'Shea, G. Blanco-Brieva, J. M. Campos-Martin, J. L. G. Fierro. TD-DFT analysis of the electronic spectra of Ti-containing catalysts. In: 228th ACS National Meeting, Philadelphia (USA), 2004.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, G. Delgado-Barrio, R. Prosmiiti, A. Valdés, P. Villarreal. Potential surfaces and dynamics of vdW complexes. In: MOLEC XV, Nunspeet (THE Netherlands), 2004.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Francisco Corzana, Igor Cuesta, Agatha Bastida, Ana Hidalgo, Monserrat Latorre, Carlos González, Eduardo García Junceda, Jesús Jiménez-Barbero and Juan Luis Asensio. Estudio por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Dinámica Molecular (DM) de la estructura en agua del antibiótico estreptomycin y de su inactivación por la 6-adeniltransferasa. In: VII Jornadas de Carbohidratos celebradas en septiembre de 2004 en Tarragona.

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. Kaczmariski, R. Rurali and E. R. Hernández, Reversible scaling free energy calculations in silicon, publicado nos proceedings do 3rd International Conference on

Computational Modeling and Simulation of Materials, que tivo lugar entre o 30 de maio e o 4 de xuño de 2004 en Acireale (Sicilia, Italia).

CSIC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A. Ros, M.D. Balaguer, E. Fuente, D. Suárez, M.J. Martín, M.A. Montes-Morán, M. Catalytic activity of dried sludge and sludge-based chars on H₂S removal: effect of sewage sludge pre-treatment. In: Rigola International Congress on Catalysis, Paris, Julio de 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, Protein-carbohydrate interactions: on the origin of carbohydrate-aromatic interactions. Theoretical study of the pyranose ring distortion. In: 2ª Reunión Bienal del grupo especializado de RMN de la RSEQ. Santiago de Compostela, septiembre 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, On the use of glycometrics as potential drugs: nmr analysis of the conformational differences between o- and c-, trehaloses. In: 2ª Reunión Bienal del grupo especializado de RMN de la RSEQ. Santiago de Compostela, septiembre 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, María del Carmen Fernández Alonso, Gabriel Cuevas and Jesús Jiménez-Barbero. Protein-carbohydrate interactions: on the origin of carbohydrate-aromatic interactions. Theoretical study of the pyranose ring distortion. In: 2ª Reunión Bienal del grupo especializado de RMN de la RSEQ. Santiago de Compostela, septiembre 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, Begoña Martínez Cruz, José A. Godoy. Exploring the evolutionary origins of the imperial eagles. In: The Quaternary Legacy, Lisboa, Portugal, 22-23 Octubre 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, J.Ortega Castro, N. Hernández Haro, C.I. Sainz Díaz y A. Hernández Laguna. Optimización de pseudopotenciales atómicos para el estudio mecanocuántico de la estructura cristalina de filosilicatos 2:1 dioctaédricos. Jornadas Científicas de la Sociedad Española de Arcillas, 15 de Noviembre de 2004 .

CSIC, CONGRESO, POSTER, D. Lopez-Duran, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek. Influence Of The Bosonic Or Fermionic Character Of The Helium Atom On The Raman Spectra Of Br₂-He Clusters. In: ECAMP VIII, Rennes (Francia), 6-10 de Julio de 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, D. Lopez-Duran, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek. Effect On The Interaction On The Quantum Solvent Arrangement In Br₂ Helium Droplets. In: ECAMP VIII, Rennes (Francia), 6-10 de Julio de 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, A. Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio. Three-Dimensional Ab initio Potential and ground state dynamics of HeI₂ complex. In: ECAMP 8, Rennes (FRANCE), 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, A. Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio, Ab initio calculations, potential representation and vibrational dynamics of He₂Br₂ van der Waals complex. In: ECAMP 8, Rennes (FRANCE), 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, S. López-López, R. Prosimiti, A. García-Vela, Potential energy surface and ro-vibrational states of the ground Ar₂HI complex.. In: ECAMP 8, Rennes (FRANCE), 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, S. López-López, R. Prosimiti and A. García-Vela, Quantum Treatment of the Ar₂HI Photodissociation Dynamics. In: ECAMP 8, Rennes (FRANCE), 2004.

CSIC, CONGRESO, PÒSTER, "Hydrogen transfer from the OH group to oxygen-centered radicals: Proton-coupled electron transfer versus radical hydrogen abstraction". Santiago Olivella, Josep M. Anglada, Albert Solé and Josep M. Bofill, in: ESPA 2004, Electronic Structure: Principles and Applications, Valladolid, Spain, 17-17 Sept. 2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, Manuel Martín-Pastor, Ángeles Canales, Francisco Corzana López, Juan Luis Asensio, Jesús Jiménez-Barbero. Estudio conformacional en disolución acuosa de la lactosa mediante la medida de Constantes Residuales Dipolares (RDCs) y DM. In: II Reunión Bianual-GERMN. Santiago de Compostela, 9-2004.

CSIC, CONGRESO, POSTER, Francisco Corzana, Jesús H. Busto, María L. García, Jesús M. Peregrina, Alberto Avenoz, Jesús Jiménez-Barbero, Juan L. Asensio. Propiedades estructurales de O-Glicósidos derivados de serina y treonina. In: II Reunión Bianual-GERMN. Santiago de Compostela, 9-2004.

CSIC, TESE DOUTORAL, DEFENDIDA, G. Avila, Espectroscopia Raman de Rotación-Vibración de algunas moléculas de interés: H₂O, D₂O, HDO, (CO₂)₂ y (N₂)₂, dirigida por Salvador Montero

Martín, Profesor de Investigación del Instituto de Estructura de la materia del CSIC. Nota obtenida: “sobresaliente cum laude”.

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

CSIC, OUTRO, DIPLOMA DE ESTUDOS AVANZADOS (DEA), Oscar Picazo, Xullo-2004.

CSIC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, El Hidrógeno como vector energético limpio: nuevos conceptos de producción y uso (HIVELIO). (ENE2004-07345-c03-01/ALT) ENTIDAD FINANCIADORA: CICYT DURACION DESDE: 2004 HASTA: 2007 INVESTIGADOR/A PRINCIPAL: Dr. J. L. G. Fierro.

CSIC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, "Theoretical Studies of Electronic and Dynamical Processes in Molecules and Clusters. Financiado por: Unión Europea, referencia: HPRN-CT-1999-00005

CSIC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, “Dinámica de procesos moleculares desde a fase gas ata a interfase gas/materia condensada”. Financiado pola D.G.I. do Ministerio de Ciencia y Tecnología, referencia: BFM 2001-2179.

Producción científica declarada por grupos de trabajo do Instituto Español de Oceanografía – IEO:

IEO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Manuel Ruiz Villarreal and Hans Burchard, Modelling suspended particulate matter dynamics and turbidity maxima in partially stratified estuaries, Extended abstract, PECS (Physics of Estuaries and Coastal Seas) 2004, Merida (Méjico).

Producción científica declarada por grupos de trabajo da Universidade da Coruña – UDC:

UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Fuentes, M. Slight differences among individuals and the unified neutral theory of biodiversity. In: Theoretical Population Biology, 66 (2004), 199-203.

UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Tarrío J, Tourino J, Martín MJ, González P, Doallo R. A grid portal to support high-performance scientific computing on distributed resources. In: IEICE Transactions On Information And Systems E87D (7): 1843-1849, JUL 2004.

UDC, ARTIGO, PUBLICADO, C. Platas-Iglesias, M. Mato-Iglesias, K. Djanashvili, R. N. Muller, L. Vander Elst, J. A. Peters, A. de Blas, T. Rodríguez-Blas. “Lanthanide Chelates Containing Pyridine Units with Potential Application as Contrast Agents in MRI”. In: Chem Eur. J., 10, 3579-3590 (2004).

UDC, ARTIGO, PUBLICADO, Jayanta Kumar Ray, Haldar, M. Canle L., J. A. Santaballa, Jose Mahía. Diethyl(1-(4-fluorophenyl)/3,4-dichlorophenyl)-5-oxo-3-(2-furyl)pyrrolidine -2,2-dicarboxylate. In: Acta Crystallogr. C, vol. 60, p. 163-165, 2004.

UDC, ARTIGO, ENVIADO, E. Saavedra, A. Ramil, J.C. Álvarez, J.M. Amado, A.J. López, J. Sanesteban, M.J. Tobar, A.J. Yáñez. Laser hardening simulation with the finite element method: an analysis of the errors introduced by discretization Proceedings V. I, (ECCOMAS 2004), July, 2004.

UDC, ARTIGO, ENVIADO, E. Saavedra, A. Ramil, J.C. Álvarez, J.M. Amado, M.J. Tobar, A.J. Yáñez. Modelización numérica de procesos de temple de aceros con láser. In: Anales de la Ingeniería Mecánica, A. 15, V. 2, p. 1241-1246, Decembro, 2004

UDC, ARTIGO, ENVIADO, 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. ChemPhysChem (2005, in press, Received: 27 July 2004; Revised: 19 October 2004, <http://dx.doi.org/10.1002/cphc.200400349>).

UDC, ARTIGO, ENVIADO, 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”. In: Inorg. Chem.

UDC, ARTIGO, IN-PRESS, Tourino J, Martín MJ, Tarrío J, Arenaz M. A Grid Portal for an Undergraduate Parallel Programming Course. Author(s): Source: IEEE Transactions on Education.

UDC, ARTIGO, IN-PRESS, 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”. In: Inorg. Chem.

UDC, ARTIGO, IN-PRESS, M. Canle L., M. I. Fernández, J. A. Santaballa, J. Developments on the Mechanism of Photodegradation of Triazine-Based Pesticides. Sent to: Phys. Org. Chem.

UDC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Balanceo dinámico de la carga en la simulación de la dispersión atmosférica de contaminantes" XV Jornadas de Paralelismo. Actas del Congreso. pp. 138 Almería.

UDC, CONGRESO, PÓSTER, D.R. Ramos, M. Canle L., M.V. García, J.A. Santaballa. Electronic and Steric Effects on the Base-Assisted Decomposition of (N-halo)-Alcoholamines. Congreso: Reaction Mechanisms VII. Lugar celebración: Dublín (Irlanda). Data: 4-8/7/2004.

UDC, CONGRESO, PÓSTER, D.R. Ramos, M. Canle L., M.V. García, J.A. Santaballa. Interplay between "Old" and "New" Chemistry: Estimation of Microscopic pKa's. Congreso: Reaction Mechanisms VII. Lugar celebración: Dublín (Irlanda). Data: 4-8/7/2004.

UDC, CONGRESO, PÓSTER, R. Pou-Amérigo, L. Serrano-Andrés, A. Freire, M. Canle L., J.A. Santaballa, M. Sarakha. A combined theoretical and experimental study of the photophysics of asulam. Congreso: Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress (International Conference in Honour of N.C. Handy). Lugar celebración: Cambridge (U.K.). Data: 24-29/7/2004.

UDC, CONGRESO, PÓSTER, D.R. Ramos, M. Canle L., M.V. García, J.A. Santaballa. Chloride Ion in the MPO-Catalyzed Chlorination Reaction: Substrate or Inhibitor? Congreso: 4th International Peroxidase Meeting. Lugar celebración: Kyoto (Japón). Data: 27-30/10/2004.

UDC, TESE DOUTORAL, DEFENDIDA, E. Saavedra Otero, Simulación numérica de procesos de tratamiento térmico superficial de aceros con láser de potencia. Lida en maio de 2004.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Complejos de los Lantánidos con Potenciales Aplicaciones Tecnológicas". Doctorando: Marta Mato Iglesias. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas e Carlos Platas Iglesias. Data probable de defensa: segunda metade de 2005.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Doutorando: Luis F. Rodríguez Vázquez, previsión de defensa: ano 2006. Tema: Reacciones de cloración de compostos nitroxenados.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Doutorando: Manuel A. Peiteado Peiteado, previsión de defensa: ano 2005. Tema: Fotodegradación de compostos relacionados coa estrutura da anilina e a familia das triazinas.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Doutorando: Daniel Rodríguez Ramos, previsión de defensa: ano 2005/6. Tema: Caracterización cinética e computacional da acción oxidante do sistema enzimático mieloperoxidasa / peróxido de hidróxeno / ion cloruro.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Doutorando: Antonio Freire Corbacho, previsión de defensa: ano 2005. Tema: Degradación química e fotoquímica de pesticidas derivados das sulfonilureas.

UDC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Dicho trabajo se centra en probar diferentes estrategias de paralelización y balanceo de la carga de una aplicación científica de simulación, el STEM-II".

UDC, TESE DE LICENCIATURA, EN PROCESO, "Estudio Conformacional de los complejos de ZnIIciclám". Estudiante: Raquel Ferreirós Martínez. Directores: Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas e Carlos Platas Iglesias. Data: en Realización. Data probable de defensa Marzo 2005.

UDC, TESE DE LICENCIATURA, EN PROCESO, "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. Estudiante: Lea Vaiana. Data probable de defensa: segunda metade de 2005.

UDC, DIPLOMA DE ESTUDOS AVANZADOS, Eduardo Carro Rey.

UDC, DIPLOMA DE ESTUDOS AVANZADOS, Sonia Vilarino Pariño.

UDC, DIPLOMA DE ESTUDOS AVANZADOS, José Luis Vázquez Rodríguez.

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

USC, ARTIGO, PUBLICADO, V. Blanco, P. González, J. C. Cabaleiro, D. B. Heras, T. F. Pena, J.J Pombo and F.F. Rivera. Performance prediction for parallel iterative solvers. Journal of Supercomputing. Vol 28, pp 177-191 (2004)

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J.C. Mouriño, M.J. Martín, P. González, M. Boullón, J.C. Cabaleiro, T.F. Pena, F. F. Rivera and R. Doallo. A grid enable air pollution simulation. Lecture notes in computer science. Vol. 2970, pp 155 – 162 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Natalia Seoane and A.J.García Loureiro. Analysis of Parallel Numerical Libraries to Solve the 3D Electron Continuity Equation. Lecture Notes in Computer Science. Vol. 3036, pp 590-593, June (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J.M.López González and A.J.García Loureiro. Physics based model for tunnel heterostructure bipolar transistor. Semiconductor Science and Technology. Vol. 19, No. 11, pp 1300-1305 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, A.J.García Loureiro and J.M.López González. A model for abrupt double heterojunction bipolar transistors. International Journal of Numerical Modelling: Electronics networks, devices and field. Vol. 17, 29-42, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, P.González, J.C.Cabaleiro and T.F.Pena. Parallel sparse approximate preconditioners applied to the solution of systems. Engineering Analysis with Boundary Element. Vol. 28(9), pp 1061-1068 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, P.González, J.C.Cabaleiro and T.F.Pena. Iterative solution of large linear systems with non-smooth submatrices using partial wavelet transforms and split-matrix matrix-vector multiplication. Int. Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol. 59 pp. 457-473 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, V.Blanco, P.González, J.C.Cabaleiro, D.B.Heras, T.F.Pena, J.J.Pombo and F.F.Rivera. Performance of parallel iterative solvers: a library, a prediction model and a visualization tool. Journal of Information Science and Engineering. Special Issue: Parallel and Distributed Computing. Vol. 18, No. 5, pp. 763-785 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, A.J. García Loureiro and J.M.López González, Electron quasi-fermi level splitting at the base-emitter junction of HBTs and DHBTs. Semiconductor Science and Technology. Vol. 19, No. 3, pp 552 - 557 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO: Fredy Sussman, Antonio Rumbo, M. Carmen Villaverde y Antonio Mouriño Predicting the Cell Differentiation Activity of 1 α ,25-Dihydroxyvitamin D₃ Side Chain Analogues from Docking Simulations. In: J. Med. Chem., 47, 1613-1616 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "L-Galactose as a Natural product: Isolation from a Marine Octocoral of the First ?-L-Galactosyl Saponin", GUTIÉRREZ, M.; CAPSON, T.; GUZMÁN H. M.; QUIÑOÁ, E.; RIGUERA, R. Tetrahedron Letters, 2004, 45, 7833-7836.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J. L. Cacheiro, B. Fernández, D.Marchesan, S.Coriani, C.Hättig, and A.Rizzo. ``Coupled cluster calculations of the ground state potential and interaction induced electric properties of the mixed dimers of helium, neon and argon"; In:Mol. Phys., 102, 101 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, C. R. Munteanu, J. López Cacheiro, B. Fernández. ``Accurate rovibrational spectrum of the Ne—N₂ van der Waals complex"; In:J. Chem. Phys. 120, 9104 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J. L. Cagide Fajín, J. López Cacheiro, B. Fernández. ``Fluorobenzene-argon ground-state intermolecular potential energy surface "; Revista:J. Chem. Phys. J. Chem. Phys. 120, 8582 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, C. R. Munteanu, J. López Cacheiro, B. Fernández. `` Chlorobenzene-argon ground-state intermolecular potential energy surface "; Revista:J. Chem. Phys., 121, 1390 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J.L. Cagide Fajín, J. López Cacheiro, B. Fernández. `` Accurate intermolecular ground-state intermolecular potential of the Ne-HCl van der Waals complex"; Revista:J. Chem. Phys., J. 121, 4599 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, C. R. Munteanu, J. López Cacheiro, B. Fernández. "Accurate intermolecular ground state potential of the Ar-N₂ van der Waals complex"; In: J. Chem. Phys., 121, 10419 (2004).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, Z. Smedarchina, A. Fernández Ramos e W. Siebrand. Tunneling dynamics of double proton transfer in formic acid and benzoic acid dimers. Accepted in Journal of Chemical Physics.

USC, ARTIGO, ENVIADO, J.C.Pichel, D.B.Heras, J.C.Cabaleiro and F.F.Rivera. Performance optimization of irregular codes based on the combination of reordering and blocking techniques. (ENVIADO A LA REVISTA PARALLEL COMPUTING).

USC, ARTIGO, ENVIADO, "Determining the Absolute Stereochemistry of Secondary/Secondary Diols by ¹H NMR. Basis and Applications." Freire F.; Seco, J. M.; Quiñoá, E.; Riguera, R. Journal of Organic Chemistry. Enviado 2004. Aceptado 2005.

USC, ARTIGO, ENVIADO, J.C.Pichel, D.B.Heras, J.C.Cabaleiro and F.F.Rivera. A new technique to reduce false sharing in parallel irregular codes based on distance functions (ENVIADO AL CONGRESO EUROPAR 2005) .

USC, ARTIGO, PUBLICADO, P. Carracedo, M. Barreiro, S. Torres, P. Montero, V. Pérez-Muñuzuri y V. Pérez-Villar. Acoplamiento de un modelo hidrodinámico de escala global con uno de escala regional para Galicia. In: Revista da Real Academia Galega de Ciencias Vol. XXII.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Control of chemical pattern formation by a clock-and-wavefront type mechanism. M. Kærn, D. G. Míguez, A. P. Muñuzuri, M. Menzinger, Biophys. Chem. 110, 231 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Traveling-Stripe Forcing Generates Hexagonal Patterns. D. G. Míguez, E. M. Nicola, A. P. Muñuzuri, J. Casademunt, F. Sagués, L. Kramer, Phys. Rev. Lett. 93, 048303 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Control of the behavior in a neuronal system with time-delay. Nieves Lorenzo, Noelia Montejo, Vicente Pérez-Muñuzuri and Vicente Pérez-Villar. Neurocomputing 58-60 705-712 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Global and Local Noise on Diffusively Coupled Neural Networks. M.N. Lorenzo, N. Montejo, V. Pérez-Muñuzuri and V. Pérez-Villar Fluctuation and Noise Letters 4(4) (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Spatiotemporal behavior in networks of Ca³ region in the hippocampus. Noelia Montejo, Nieves Lorenzo, Vicente Pérez-Muñuzuri y Vicente Pérez-Villar. CNS*03 The Annual Computational Neuroscience Meeting Computational Neuroscience: Trends in Research 2004. Ed. E. De Schutter. Elsevier (Amsterdam, The Netherlands, 2004) ISBN: 0-444-51649-pp. 705-712 (total pages 1234).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, On the effect of time correlated noise and periodic forcing on a neuronal system. Noelia Montejo, Nieves Lorenzo, Vicente Pérez-Muñuzuri and Vicente Pérez-Villar. Instabilities and Nonequilibrium Structures IX ISBN 1-4020-1950-5. Ed. Kluwer.13(9) -259 (2004). Ed. Kluwer Academia Publishers. Dordrecht (2004). Harsbound.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Bandstructure study of magnetic and orbital order in BaCoO₃" V. Pardo, P. Blaha, M. Iglesias, D. Baldomir, K. Schartz, M. Pereiro, J. Botana, J. E. Arias. In: Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Influence of interfacial scattering and surface roughness on giant magnetoresistance in Fe/Cr trilayers using ab initio layer potentials". M. Pereiro, J. Botana, D. Baldomir, K. Warda, L. Wojtczak, S. V. Man'kowsky, M. Iglesias, V. Pardo, J. E. Arias. In: Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Ab initio electronic structure of rare earth orthoferrites". M. Iglesias, A. Rodríguez, P. Blaha, V. Pardo, D. Baldomir, M. Pereiro, J. Botana, J. E. Arias, K. Schwartz. In: Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Evidence for magnetic clusters in BaCoO₃". V. Pardo, J. Rivas, D. Baldomir, M. Iglesias, P. Blaha, K. Schwartz and J. E. Arias. In: Physical Review, B 70, 212404 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Magnetic structure and orbital ordering in BaCoO₃, from first-principles calculations". In: Physical Review, B 70, 144422 (2004).

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Cabaleiro-Lago, E.M., J.M. Hermida-Ramon, y J. Rodriguez-Otero. "Computational Study of the Interaction in (CH₃)₂X Dimer and Trimer (X = O, S)". In: Journal of Physical Chemistry. 108 Páginas: 4923-4929, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Ferreiro, M.L., J. Rodriguez-Otero, y E.M. Cabaleiro-Lago. "Ab Initio and DFT Study of the Influence of the Allene Group on the Diels-Alder Reaction". In: Structural Chemistry. 15 Páginas: 323-326, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Hermida-Ramon, J.M., E.M. Cabaleiro-Lago, y J. Rodriguez-Otero. "Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters". In: Chemical Physics. 302 Páxinas: 323-326, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Montero-Campillo, M.M., J. Rodriguez-Otero, y E.M. Cabaleiro-Lago. "Ab Initio and DFT Study of the Reaction Mechanism of iformylketene with Formamide". Journal of Physical Chemistry. 108 Páxinas: 8373-8377, 2004.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, Pena-Gallego, A., J. Rodriguez-Otero, y E.M. Cabaleiro-Lago. "A DFT Study of the Boulton-Katritzky Rearrangement of (5R)-4-Nitrosobenz[c]isoxazole and Its Anion: Pseudopericyclic Reactions with Aromatic Transition States". In: Journal of Organic Chemistry. 69 Páxinas: 7013-7017, 2004

USC, ARTIGO, PUBLICADO, "Time structure of muons in air showers". L. Cazón-Boado, R.A. Vázquez, A.A. Watson e E. Zas. In: Astropart. Phys. 21 (2004) 71.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, J.Pena, L Franco, F Gómez, A Iglesias, R Lobato, J Mosquera, A Pazos, J Pardo, M Pombar, A Rodríguez and J Sendon, Commissioning of a medical accelerator photon beam Monte Carlo simulation using wide-field profiles, Phys. Med. Biol. 49 4929-4942.

USC, ARTIGO, PUBLICADO, A. Bermúdez, M. V. Otero "Numerical solution of a three-dimensional solidification problem in aluminium casting" Finite Elements in Analysis and Design 40 (2004) 1885-1906.

USC, ARTIGO, IN-PRESS, "Depth development of extensive air showers from muon time distribution". L. Cazón-Boado, R.A. Vázquez e E. Zas. In press: astro-ph / 0412338, Astroparticle Physics. USC, ARTIGO, IN-PRESS, "Collective behavior in nuclear interactions and shower development". V. Canoa, N. Armesto, C. Pajares e R. A. Vázquez. In press: astro-ph / 0409619, Astroparticle Physics.

USC, USC, ARTIGO, IN-PRESS, "Cálculos de trayectorias cuasi-clásicas de la fotodisociación de CF₂CHCl a 193 nm: Distribuciones de energía en productos de las eliminaciones de HF y HCl". Saulo Vázquez and Emilio Martínez-Núñez. Submitted to: Journal of Chemical Physics.

USC, ARTIGO, IN-PRESS, Spatiotemporal forcing of Turing patterns. F. Sagués, D. G. Míguez, E. M. Nicola, A. P. Muñuzuri, J. Casademunt, L. Kramer, Physica D.. Experimental steady pattern formation in reaction-diffusion-advection systems. D. G. Míguez, R. A. Satnoianu, A. P. Muñuzuri (Submitted to Phys. Rev. Lett).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, Turing instability controlled by spatiotemporal-imposed dynamic. D. G. Míguez, V. Pérez-Villar, A. P Muñuzuri. (Submitted to Phys. Rev. E).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, The role of differential growth in pattern formation. D. G. Míguez, M. Dolnik, A. P. Muñuzuri. (Submitted to Biophys. Chem.).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, Robustness and Stability of Flow-Distributed-Structures. D. G. Míguez, G. Izúz, A. P. Muñuzuri (Submitted to Phys. Rev. E).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, Spatiotemporal patterns in active media forced with gravity waves. J.I. Deza, D.I. Roncaglia, V. Pérez-Muñuzuri, V. Pérez-Villar and A.P. Muñuzuri (Submitted to Phys. Rev. Lett).

USC, ARTIGO, IN-PRESS, A. Bermúdez, J.L. Ferrín y A. Prieto Título: Finite element solution of a new displacement/pressure poroelastic models in acoustics, in press in: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.

USC, ARTIGO, ENVIADO, B. Gómez, M. N. Lorenzo and V. Pérez-Muñuzuri. luence of boundary conditions and multi-parameterizations in medium-range ensemble forecasts for regional purposes. Submitted to: Nonlinear Processes in Geophysics.

USC, ARTIGO, ENVIADO, "MC Simulation of a Physical Gel". Y. Piñeiro Redondo, A. Lopez-Quintela, J. Rivas. Submitted to: Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects.

USC, ARTIGO, ENVIADO, A. Bermúdez, M. V. Otero "An existence result for a two-phase Stefan problem in Direct Chill Casting and Electromagnetic Casting" Mathematical Methods in the Applied Sciences.

USC, ARTIGO, EN PREPARACIÓN, "The prediction of the Absolute Stereochemistry of primary/Secondary Diols by 1H NMR: Principles and Application." Freire F.; Seco, J. M.; Quiñoá, E.; Riguera, R. Chemistry A European Journal. Enviado 2005.

ARTIGO, EN PREPARACIÓN, "Dinámica de la disociación inducida por colisiones de Xe+[Cr(CO)6]+". Saulo Vázquez and Emilio Martínez-Núñez.

USC, LIBRO, F. F. Rivera, M. Bubak, A. Gómez, R. Doallo. Grid Computing. First European Across Grid Conference. Springer, 2004. ISBN 3-540-21048-2

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J.C.Pichel, D.B.Heras, J.C.Cabaleiro, M.Boullón and F.F.Rivera. Mejora de la localidad en SMPs: el producto matriz dispersa-vector como caso de estudio. XV Jornadas de Paralelismo. Almería (2004).

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A.J.García Loureiro and J.M.López González. 3D Numerical Modeling of Continuity Equations for Abrupt HBTs at the Heterojunction Interface. Proceedings of the 2004 International Conference on Computational & Experimental Engineering & Science. Portugal, July 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A.J.García Loureiro and J.M.López González. Cálculo de parámetros de pequeña señal para transistors bipolares utilizando un simulador tridimensional y paralelo. International Conference on Telecommunications and Electronics, TELECOM 2004, July 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Natalia Seoane and A.J.García Loureiro. Study of numerical libraries to solve the 3D Poisson equation in advanced transistors. High Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2004). Valencia, Junio (2004).

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Natalia Seoane and A.J.García Loureiro. Estudio de métodos iterativos aplicados a la resolución paralela de la ecuación de Poisson. Congresso de Métodos computacionais em Engenharia. Lisboa (Portugal), Junio (2004)

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J.C.Pichel, D.B.Heras, J.C.Cabaleiro and F.F.Rivera. Improving the Locality of the Sparse Matrix-Vector Product on Shared Memory Multiprocessors. Proceedings of the Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network Based Processing, PDP2004. pp.66-71, (2004)

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J.C.Pichel, D.B.Heras, J.C.Cabaleiro, M.Boullón and F.F.Rivera. Mejora de la localidad en SMPs: el producto matriz dispersa-vector como caso de estudio XV Jornadas de Paralelismo. Almería (2004)

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, I. Pardines and F. F. Rivera. Minimizing the load redistribution cost in cluster architectures. Proceedings of the Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network Based Processing, PDP2004, (2004)

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Influence of the topography and the convective parameterization scheme to forecast heavy atlantic rainfall events. B. Hervella, C.F. Balseiro and V. Pérez-Muñuzuri. XXVIII Jornadas Científicas de la Asociación Meteorológica Española. 5º Encuentro hispanoluso de Meteorología. Badajoz 11 al 13 de Febrero de 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Atlantic and Mediterranean heavy rainfall events forecast: topography, model resolution and convective parameterization scheme influences. B. Hervella, C.F. Balseiro y V.Pérez-Muñuzuri. 1st General Assembly. Niza, Francia, 25 - 30 April 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, How to improve heavy rainfall events simulations with increasing resolution? An answer from a convective parameterization scheme perspective. B. Hervella, C.F. Balseiro y V. Pérez-Muñuzuri. 6th Plinius Conference on Mediterranean Storms, Mediterranean Sea, 17-24 Octubre 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Mesoscale data assimilation system to complex terrain using Incremental Analysis Updates (IAU) applied operationally in Galicia (NW of Spain). C.F. Balseiro, K. Brewster y V. Pérez-Muñuzuri. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Severe local storms forecast with a non-hydrostatic numerical mesoscale model in Cuba. C.F. Balseiro, G. Aguilar, L. Naranjo, V. Pérez-Muñuzuri y M. Carnesoltas. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Impacto de la temperatura de la superficie del mar (SST) en un modelo numérico de mesoscala. C.F. Balseiro, B. Gómez, E. Penabad, P. Montero y V. Pérez-

Muñuzuri. XXVIII Jornadas Científicas de la Asociación Meteorológica Española. 5º Encuentro hispanoluso de Meteorología. Badajoz 11 al 13 de Febrero de 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Towards regional operational oceanography. P. Carracedo, M. Barreiro, P. Montero, S. Torres López, M. Ruiz-Villarreal, P.C. Leitaó, V. Pérez-Muñuzuri and V. Pérez-Villar. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Evaluation of a Radiative Transfer Model for Ultraviolet Index Operational Forecast in Galicia (Spain). Pettazzi, A.; Montero, P.; Balseiro, C.; Souto, J.A.; Pérez-Muñuzuri, V. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, An Evaluation of FLEXPART Model for Air Pollution Modelling around a Power Plant. E. Penabad, M. J. Souto, V. Pérez-Muñuzuri, J.A. Souto and J.L. Bermúdez. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, B. Gómez, M. N. Lorenzo and V. Pérez-Muñuzuri. Influence of boundary conditions and multi-parameterizations in medium-range ensemble forecasts for regional purposes. 1st General Assembly EGU. Niza, Francia, 25-30 Abril 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, B. Gómez, M. N. Lorenzo and V. Pérez-Muñuzuri. Influence of boundary conditions and multi-parameterizations in medium-range ensemble forecasts for regional purposes. Workshop on ensemble forecast methods, Exeter, 18-21 Octubre 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, 'Accurate theoretical evaluation of van der Waals complex rovibrational spectra', J.L. Cagide Fajín, J. Makarewicz, C.R. Munteanu, J. López Cacheiro, B. Fernández; XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy, Krakow, septiembre 2004.

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, M. Sánchez, V. Garonne, R. Graciani Díaz, R. Vizcaya Carrillo, J.J. Saborido Silva. A Lightweight Monitoring and Accounting System for the LHCb DC04 Production. In: 2004 Conference for Computing in High Energy and Nuclear Physics, proceedings de la conferencia. Interlaken, Switzerland, 27th September -- 1st October 2004. http://fpegaes1.usc.es/downloads/chep2004_monitoring_accounting_proceedings.pdf

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, A. Tsaregorodtsev et al. DIRAC, The Distributed MC Production and Analysis for LHCb. In: 2004 Conference for Computing in High Energy and Nuclear Physics, proceedings de la conferencia. Interlaken, Switzerland, 27th September -- 1st October 2004. http://fpegaes1.usc.es/downloads/DIRAC_CHEP04.pdf

USC, CONGRESO, PRESENTACIÓN, J. Closier et al. Results of the LHCb experiment Data Challenge 2004. In: 2004 Conference for Computing in High Energy and Nuclear Physics, proceedings de la conferencia. Interlaken, Switzerland, 27th September -- 1st October 2004, <http://fpegaes1.usc.es/downloads/LHCbresults-DC04.pdf>

USC, CONGRESO, POSTER, M. Boullón, J.C. Cabaleiro, R. Doallo, P. González, D.R. Martínez, M. Martín, J.C. Mouriño, T.F. Pena, F.F. Rivera. Modelling execution time of selected computation and communication kernels on Grids". European Grid Conference 2005. Science Park Amsterdam, The Netherlands, February 14 -16 2005.

USC, CONGRESO, POSTER, Fredy Sussman, Lucía González, M. Carmen Villaverde, Juan Carlos Estévez y Ramón Estévez. Design of novel peptidic beta-secretase (Memapsin-2) inhibitors. In: 40èmes Reencontres Internationales de Chimie Thérapeutique, libro de resumes. Bordeaux (France), Junio-Julio 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, Fredy Sussman, Lucía González, M. Carmen Villaverde, Juan Carlos Estévez y Ramón J. Estévez. Design of novel peptidic beta-secretase (Memapsin-2) inhibitors. 5th Spanish Italian Symposium on Organic Chemistry, libro de resumes. Santiago de Compostela, septiembre 2004.

USC, CONGRESO, PÓSTER, Silvia G. Rubín, Jesús A. Varela, Luis Castedo and Carlos Saá. "Formal" Ru(II) Catalyzed Cycloadditions of 1,6-Diynes to Arenealkylidenes". In: 5th Spanish Italian Symposium on Organic Chemistry. Santiago de Compostela, España, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, M. Merced Montero-Campillo, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Ángeles Peña-Gallego, Jesús Rodríguez-Otero, J.M.Hermida-Ramón. "Ab initio and dft study of the aromaticity of fulvalenes derived from methylidenecyclopropanes". In: ESPA2004, Valladolid, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, Jose M. Hermida-Ramón, Enrique M. Cabaleiro-Lago, M. Merced Montero-Campillo, Ángeles Peña-Gallego, Jesús Rodríguez-Otero. "Theoretical characterization of the structures and energies of the benzene-(h₂s)_n (n=1-4) clusters". In: ESPA2004, Valladolid, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Beatriz Caseiro-Blanco, Jose M. Hermida-Ramón, Mercedes Montero-Campillo, Ángeles Peña-Gallego, Jesús Rodríguez-Otero. "DFT study of so₂ elimination from 2,5-dihydrothiophene 1,1-dioxide and derivatives". In: ESPA2004, Valladolid, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, Jesús Rodríguez-Otero, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Rosa M. García-López, Jose M. Hermida-Ramón, M. Merced Montero-Campillo, Ángeles Peña-Gallego. 18 of 33. "Dft study of the pseudopericyclic character of electrocyclization in 1,2,4,6-heptatetraene analogues". In: ESPA2004, Valladolid, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, A. Peña-Gallego, E. M. Cabaleiro-Lago, J. M. Hermida-Ramón, M. M. Montero-Campillo, J. Rodríguez-Otero. "A DFT study of the 1,3-sigmatropic rearrangement in the nitrosation of formamide. is this a pseudopericyclic process?". In: ESPA2004, Valladolid, 2004.

USC, CONGRESO, POSTER, "MC Simulation of a Physical Gel". Y. Piñeiro Redondo, A. Lopez-Quintela, J. Rivas, in: Topic.3 (Polymer, Polyelectrolytes and Gels), ECIS 2004 celebrado en setembro de 2004 en Almeria.

USC, TESE DOUTORAL, DEFENDIDA, Título: Técnicas de Compilación para la Paralelización de Códigos Irregulares. Autor: David Expósito Singh. Directores: Francisco Fernández Rivera y María José Martín Santamaría.

USC, TESE DOUTORAL, DEFENDIDA, "Estudio matemático y resolución numérica de modelos que surgen en el estudio de una colada de aluminio". Presentada no Departamento de Matemática Aplicada da Universidade de Santiago de Compostela, dirixida polo Profesor Alfredo Bermúdez de Castro. Obtuvo la calificación de Sobresañte cum Laude.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Título previsto: Paralelización de códigos de optimización sobre sistemas de memoria distribuida. Autora: Inmaculada Pardines Lence. Director: Francisco Fernández Rivera.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Título previsto: Optimization of the memory hierarchy in irregular problems. Autor: Juan C. Pichel Campos. Director: Francisco Fernández Rivera.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Título: Generación automática de mallas para problemas de elementos finitos en sistemas multiprocesador. Autor: Juan José Pombo García. Directores: Tomás Pena y José Carlos Cabaleiro.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Título previsto: Una metodología para la modelización de comunicaciones MPI en clusters y grids. Autor: Marcos Boullón Magán. Director: Francisco Fernández Rivera. USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, Título previsto: Estudio de fluctuaciones y variaciones materiales en dispositivos HEMT. Autor: Natalia Seoane Iglesias. Director: Antonio J. García Loureiro.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Determinación de la configuración absoluta de dioles y trioles mediante RMN de 1H." Presentada Enero 2005 . Félix Freire Iribarne.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Determinación de la configuración absoluta de aminoalcoholes mediante RMN de 1H." En elaboración. Victoria Leiro Rodríguez.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Determinación de la configuración absoluta de cianhidrinas mediante RMN de 1H." En elaboración. Iria Louzao Pernas.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Determinación de la configuración absoluta de trioles mediante RMN de 1H." En elaboración. Enrique Lallana Ozores.

USC, TESE DOUTORAL, EN PROCESO, "Nuevos reactivos para la determinación de la configuración absoluta por RMN " En elaboración . Silvia Porta Sandá.

USC, DIPLOMA DE ESTUDOS AVANZADOS-DEA, "Una variante en s-bloques del algoritmo de la Doble Serie Ortogonal y su implementación paralela". - Alumno de tercer ciclo: Gerardo Casal Urcera. - Directores del trabajo: Jose Antonio Alvarez Dios y Jose Carlos Cabaleiro Domínguez. - Fecha: 13 de julio de 2004. - Departamento: Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela. -

Programa de tercer ciclo: "Métodos numéricos en ecuaciones en derivadas parciais. Aplicacións na enxeñería".

USC, OUTRO, TESE DE LICENCIATURA, DEFENDIDA, "Estudio de espectros rovibracionales en complejos de van der Waals", Silvia D. Bouzón Capelo, julio 2004.

USC, TESE DE LICENCIATURA, DEPOSITADA PARA A SÚA LECTURA, Título: Modelización e mellora do comportamento computacional na simulación paralela da dispersión atmosférica de contaminantes. Autor: Diego Rodríguez Martínez. Directores: José Carlos Cabaleiro Domínguez y Tomás Fernández Pena.

USC, TESE DE LICENCIATURA, EN DESENVOLVEMENTO, Título previsto: Optimización de un mallador basado en octrees aplicado a dispositivos semiconductores. Autor: Manuel Aldegunde. Director: Antonio J. García Loureiro.

USC, TESE DE LICENCIATURA, DEFENDIDA, "Estudio teórico del mecanismo de reacciones de sulfonación quelotrópica*". Beatriz Caseiro Blanco. Marzo 2004. Calificación: Sobresaliente.

USC, OUTRO, TESE DE LICENCIATURA, EN PROCESO, "Estudio de la adsorción de etileno y propeno sobre paladio" pendiente de presentación.

USC, OUTRO, TESE DE LICENCIATURA, EN PROCESO, "Estudio de la selectividad de las reacciones de adición de ciclopropanos a furano" pendiente de presentación.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, Development of GRID environment for interactive applications. Information society technologies programme. Ref: IST-2001-32243. Marzo 2002 a Febrero 2005.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, Computación de altas prestaciones para rendering: Explotación de la jerarquía de memoria y proyección de algoritmos en hardware. Ministerio de Ciencia y Tecnología (MCYT) Ref. TIC2001-3694-C02. Enero 2002 a Diciembre 2004

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, Aplicación de la Ingeniería de la Banda Prohibida al Análisis y Diseño de Nuevos Transistores Bipolares de Heterounión. Ministerio de Ciencia y Tecnología (MCYT) Ref. TIC2003-03272. Enero 2004 a Diciembre 2006.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, Xunta de Galicia.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN: "Reconocimiento de Quiralidad por RMN: Desarrollo de Procedimientos Avanzados y Aplicación a Compuestos Polifuncionales". ENTIDAD FINANCIADORA: MCyT (DGI) (BQU2002-01195). INVESTIGADOR PRINCIPAL: Ricardo Riguera Vega.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN: "Reconocimiento de quiralidad por RMN". ENTIDAD FINANCIADORA: Xunta de Galicia, PGIDIT03PXIC20908PN. INVESTIGADOR PRINCIPAL: Ricardo Riguera Vega.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, "Estudio mecanocuántico do mecanismo de reaccións pericíclicas/pseudopericíclicas. criterios válidos para a súa caracterización". Ref. PGIDIT02PXIA20901PR Entidad Financiadora: XUNTA DE GALICIA Duración Desde: 14/10/2002 Hasta: 13/10/2004. Investigador Principal: JESÚS RODRÍGUEZ OTERO.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, "Estudio mecanocuántico de reacciones pseudopericíclicas y búsqueda de sus factores determinantes". Entidad Financiadora: Ministerior de Ciencia y tecnología. Duración Desde: 15-11-2003 Hasta: 14-11-2006. Investigador Principal: Jesús Rodríguez Otero.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, "Estudio mecanocuántico de reacciones pseudopericíclicas y búsqueda de sus factores determinantes". Entidad Financiadora: Xunta de Galicia-Incentivos. Duración Desde: 14-11-2003 Hasta: 14-11-2006. Investigador Principal: Jesús Rodríguez Otero.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, "Mantenimiento y mejora del Sistema de Apoyo a la Decisión para la Gestión de la Calidad del Aire", dentro do cal se realiza o "Ensayo episódico y mejora del modelo meteorológico del SAGA" aplicado á Central Térmica de Endesa-As Pontes. Proxecto financiado por Endesa, e baseado en mellorar algúns aspectos dos modelos meteorolóxico, como as parametrizacións de capa límite, para poder obter maior precisión no cálculo da dispersión de contaminantes e por tanto, da inmisión.

USC, OUTRO, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN, “Integración de inventarios de emisiones atmosféricas para la elaboración de escenarios dinámicos y su aplicación”. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología (MCYT), Plan Nacional de I+D. REN2002-02988 Entidades participantes: Universidad de Santiago de Compostela Duración, desde: septiembre 2002 hasta: septiembre 2005 Investigador responsable: D. Juan José Casares Long.

Producción científica declarada por grupos de trabajo da Universidade de Vigo-UVIGO:

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters”. Jose M. Hermida-Ramón, Enrique M. Cabaleiro-Lago, Jesús Rodríguez-Otero”. In: *Chemical Physics*, 302 (2004) 54-60.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Computational Study of the Interaction in (CH₃)₂X Dimer and Trimer (X=O, S). Enrique M. Cabaleiro Lago, Jose M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero. In: *J. Phys. Chem. A* 2004, 108, 4923-4929.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Conrotatory ring opening reactions of cyclopropyl anions in monocyclic and tricyclic systems”. Olalla Nieto Faza, Carlos Silva Lopez, Rosana Alvarez, Angel R. de Lera. In: *Org. Lett.* 2004, 6, 901.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “The Woodward-Hoffmann-DePuy rule revisited”. Olalla Nieto Faza, Carlos Silva Lopez, Rosana Alvarez, Angel R. de Lera. In: *Org. Lett.* 2004, 6, 905.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Theoretical study of the vinyl allene oxide to cyclopent-2-en-1-one rearrangement: mechanism, torquoselectivity and solvent effects”. Carlos Silva, Olalla Nieto, Darrin M. York, Angel R. de Lera. In: *J. Org. Chem.* 2004, 69, 3635.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Pseudorotation of natural and chemically modified biological phosphoranes: implications for RNA catalysis”. Carlos Silva Lopez, Olalla Nieto Faza, Brent Gregersen, Xabier Lopez, Angel R. de Lera, Darrin M. York. In: *ChemPhysChem*. 2004, 5, 1045.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Theoretical study of the electrocyclic ring closure of hydroxypentadienyl cations to cyclopentenones: the Nazarov reaction and related cationic cyclizations”. Olalla Nieto Faza, Carlos Silva Lopez, Rosana Alvarez, Angel R. de Lera. In: *Chem. Eur. J.* 2004, 10, 4324.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Solvolytic Ring-Opening Reactions of Cyclopropyl Bromides. An Assessment of the Woodward-Hoffmann-De Puy Rule”. Olalla Nieto Faza, Carlos Silva Lopez, Rosana Alvarez, Angel R. de Lera. *J. Org. Chem.* 2004, 69, 9002.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, “Balloon090100001: a bright, high amplitude sdB pulsator”. Oreiro, R., Ulla, A., Pérez Hernández, F., Ostensen, R., Rodríguez López, C. & MacDonald, J., 2004, *A&A*, 418,243.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, K. Jankowski, K. Nowakoski, R. Slupski, J.R. Flores. “Application of accurate MP2 energies for closed-shell atoms in examinations of density functionals for 3d10 electron ions”. In: *International Journal of Quantum Chemistry*, 99(4), (2004), 277-287.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, J.R. Flores. “A theoretical study of the electronic spectra of the SiC₂H radical”. In: *Chemical Physics Letters*, 392(1-3), (2004), 196-201.

UVIGO, ARTIGO, PUBLICADO, J.R. Flores, R. Slupski, K. Jankowski, P. Malinowski. “Towards second-order correlation energies for large atoms: Zn⁺² revisited”. In: *Journal of Chemical Physics* 121(24) (2004) 12334-12344

UVIGO, ARTIGO, IN-PRESS, “Ellipticity: A convenient tool to characterize electrocyclic reactions”. Carlos Silva Lopez, Olalla Nieto Faza, Fernando P. Cossio, Darrin M. York, Angel R. de Lera. Submitted to: *Chem. Eur. J.*

UVIGO, ARTIGO, IN-PRESS, “Charge density analysis of some processes involving intramolecular hydrogen transfer”. Marcos Mandado, Ricardo A. Mosquera, Ana M. Graña and Christian Van Alsenoy. In: *Tetrahedron* 61 (2005), 819-829

UVIGO, ARTIGO, IN-PRESS, J.R. Flores. “A theoretical study of the excited electronic states of the SiCN system”. Submitted to: *Chemical Physics*.

UVIGO, ARTIGO, IN-PRESS, J.R. Flores, I Pérez-Juste and L. Carballeira. “A Theoretical Study of The SiCNH Isomers”. Submitted to: *Chemical Physics*.

UVIGO, ARTIGO, ENVIADO, "QTAIM study of the electronic structure and strain energy of fluorine substituted oxiranes and thiranes". Yi-Gui Wang, Cherif Matta, Nick Henry Werstuijk. Antonio Vila, Eduardo de la Puente, Ricardo A. Mosquera. Submitted to: Chemical Physics Letters (Chem.Phy.Lett).

UVIGO, ARTIGO, ENVIADO, "On the applicability of resonance forms in pyrimidinic bases II. QTAIM interpretation of the sequence of protonation affinities". Maria J. González Moa, Ricardo A. Mosquera. Submitted to: Journal of Physical Chemistry.

UVIGO, ARTIGO, ENVIADO, "AIM interpretation of the acidity of phenol derivatives". M. Mandado, R. A. Mosquera, A. M. Graña. In: Chemical Physics Letters 386 (2004) 454-459.

UVIGO, ARTIGO, ENVIADO, Pedro Comesaña, Fernando Pérez-González and Félix Balado. On Distortion-Compensated Dither Modulation Data-Hiding with Repetition Coding. IEEE Transactions on Signal Processing.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Astroseismology of hot subdwarf stars", Oreiro, R., Rodríguez-López, C, Ulla, A., Pérez-Hernández, F., Garrido, R., Manteiga, M., & MacDonald, J., 2004. Publicado en el libro: Lecture Notes and Essays in Astrophysics, p. 133-142. Resúmenes del grupo especializado de Astrofísica de la XXIX Biental de la Real Sociedad Española de Física, 7-11 Julio 2003, Madrid.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Studies of pulsations on sdBs: structural models and frequency calculations", R. Oreiro, Ulla, A., Pérez-Hernández, F., MacDonald, J, García, R., Zapatero, M.R., 2004, Ap&SS, 291, 411.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Estimación mediante simulación molecular de la curva de inversión del metano". M. M. Piñeiro, D. Bessières, T. Lafitte, J.-L. Daridon, J. L. Legido. In: XIX Encuentro del Grupo Especializado de Termodinámica de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química. Universidad de Murcia, Orihuela (Alicante), 30 de Junio al 3 de Julio de 2004.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Un procedimiento Simple de Geo-Referenciación de Imágenes de Satélite". Autores: Santos J., Vázquez M., Fernandes F., Prado T., Castro R. In: XII Congreso Ibérico y VII Congreso Iberoamericano de Energía Solar celebrado en Vigo entre el 14 al 18 de Septiembre de 2004.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, "Determinación de la Irradiación Global Diaria a partir de un mínimo de valores de Irradiancia a lo largo del día". Autores: Vázquez M., Fernandes F., Santos J., Prado T. In: XII Congreso Ibérico y VII Congreso Iberoamericano de Energía Solar celebrado en Vigo entre el 14 al 18 de Septiembre de 2004.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, F. Balado and F. Pérez-González. Blind Turbo Decoding of Side-Informed Data Hiding Using Iterative Channel Estimation. In 5th International Workshop on Image Analysis for Multimedia Interactive Services, Lisboa, April 2004.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Pedro Comesaña and Fernando Pérez-González. Quantifying security leaks in spread spectrum data hiding: A game theoretic approach. In Edward J. Delp III and Ping W. Wong, editors, Security, Steganography, and Watermarking of Multimedia Contents VI, volume 5306, pages 592-601, San Jose, California, USA, January 2004. SPIE.

UVIGO, CONGRESO, PRESENTACIÓN, Fernando Pérez-González and Pedro Comesaña. Improved binary dither-modulation with perceptual constraints. In 5th International Workshop on Image Analysis for Multimedia Interactive Services, Lisboa, April 2004.

UVIGO, CONGRESO, POSTER, "Phosphate hydrolysis in solution and the transphosphorilation in phosphoglucomutase". Olalla Nieto Faza, Carlos Silva Lopez, Angel R. de Lera, Darrin M. York. In: Computational Chemical Dynamics: from gas-phase to condensed-phase systems. (October 7-9, 2004) Minneapolis (USA).

UVIGO, CONGRESO, POSTER, "Pseudorotation of natural and chemically modified biological phosphoranes: implications for RNA catalysis". Carlos Silva Lopez, Olalla Nieto Faza, Angel R. de Lera, Darrin M. York. Computational Chemical Dynamics: from gas-phase to condensed-phase systems (October 7-9, 2004) Minneapolis (USA).

UVIGO, CONGRESO, POSTER, "Seismological perspectives on sdBs", Oreiro, R., Pérez Hernández, F., Ulla, A., Moya, A. & Garrido, R., 2004. Congreso: Join European and National Astronomical Meeting (JENAM) 13-17 Septiembre 2004, Granada.

UVIGO, CONGRESO, POSTER, “Balloon090100001: towards the White Dwarf Stage?”, Oreiro, R., Ulla, A., Pérez Hernández, F., MacDonald, J., Ostensen, R. & Rodríguez López, C, 2004. Congreso: 14th European Workshop on White Dwarfs. 19-23 Julio 2004, Kiel (Alemania).

UVIGO, CONGRESO, POSTER, “Photometric survey searching for pulsations in sdO stars”, Rodríguez-López, C., Ulla, A., Garrido, R., Manteiga, M. , 2004. Congreso: Join European and National Astronomical Meeting (JENAM) 13-17 Septiembre 2004, Granada.

UVIGO, CONGRESO, POSTER, “Searching for pulsations among sdOs’, *Rodríguez-López, C*., Ulla, A., Garrido, R., Manteiga, M. , 2004. Tipo de comunicación: Póster. Congreso: 14th European Workshop on White Dwarfs' 19-23 Julio 2004, Kiel (Alemania).

UVIGO, CAPÍTULO DE LIBRO, Pedro Comesaña, Fernando Pérez-González, and Félix Balado. Optimal data-hiding strategies for games with ber payoffs. In Ton Kalker, Ingemar J. Cox, and Yong Man Ro, editors, Digital Watermarking: Second International Workshop, IWDW, volume 2939 / 2004 of Lecture Notes in Computer Science, pages 101-116.

UVIGO, TESE DOUTORAL, EN PREPARACIÓN, R. Oreiro : “Subenanas calientes: análisis sísmológico”.

UVIGO, TESE DOUTORAL, EN PREPARACIÓN, C. Rodríguez: “Estudio fotométrico y espectroscópico de subenanas calientes tipo O”.

UVIGO-UNIVERSIDAD DE CARTAGENA, TESE DOUTORAL, Cristina López Bravo, Estudio del Algoritmo de Asignación Jerárquica Paralela para Conmutadores de Paquetes con Colas Virtuales a la Salida, tesis doctoral, Departamento de Tecnología de la Información y las Comunicaciones, Universidad Politécnica de Cartagena, 2004.

UVIGO, TESE DE LICENCIATURA, DEFENDIDA, “Programación en Lab-VIEW para la Obtención de valores de Irradiancia a partir de Imágenes del METEOSAT”. Autora: Lorena Rosende Barbosa Directores: Manuel Vazquez Vazquez, Jose Manuel Santos Navarro.