

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DOS USUARIOS DO CESGA DO ANO 2003

O presente informe inclúe a produción científica efectuada durante o ano 2003 e para a cal os usuarios declaran ter utilizado os recursos dispoñibles no CESGA.

A seguinte táboa presenta o número de artigos publicados, presentacións en reunións científicas, teses presentadas e en proceso, así como tesinas, traballos fin de carreira e proxectos de investigación realizados.

Tipo	Número
Artículos científicos	107
Aceptados	8
Enviados	29
Publicados	70
Presentaciones en conferencias/congresos	52
Presentacións	40
Posters	12
Teses doutorais	21
En proceso	17
Defendidas	4
Tesinas	9
En proceso	5
Defendidas	4
Outros (traballos FC/proxectos investigación)	11
Total	200

A continuación detállanse as publicacións onde se recolle a produción científica á que fai referencia a táboa anterior.

Producción científica declarada por grupos de traballo do CSIC:

- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, Rita Prosmi, Pablo Villarreal, Gerardo Delgado-Barrio, “Structure and bonding fo ArCIF: intermolecular potential surface”, Israel . J. Chem., 2003, 43, x1-x8. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, Oscar Picazo, Ibon Alkorta, José Elguero, “Large Chiral Recognition in Hydrogen-Bonded Complexes and Proton Transfer in Pyrrolo [2,3-b]pyrrole Dimers as Model Compounds”, J. Org. Chem., 2003, vol.68, n°19, 7485-7489. (F1-G10)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, D. Cappelletti, M. Bartolomei, S. Cavalli, F. Pirani, M. Porrini, V. Aquilanti, “Potential energy surfaces for the benzene-rare gas systems”, Chemical Physics Letters, 2003, 367, 405-413. (F1-G13)

- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, E. Carmona-Novillo, F. Pirani, “The asymmetric dimer N₂-O₂: characterization of the potential energy surface and quantum mechanical calculation of rovibrational levels”, *Journal of Chemical Physics*, 2003, 118, 2214-2222. (F1-G13)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, F. Pirani, M. Bartolomei, V. Aquilanti, M. Scotoni, M. Vescovi, D. Ascenzi, D. Bassi, D. Cappelletti, “Orientation of benzene in supersonic expansions probed by IR-laser absorption and by molecular beam scattering”, *Journal of Chemical Physics*, 2003, 119, 265-276. (F1-G13)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, Rafael Notario, Jairo Quijano, Luis A. León, Claudia S´nchez, J. Camilo Quijano, Eduardo Chamorro, Gabriel Chuchani, “Theoretical study of the gas-phase decomposition of neutral α -amino acid ethyl esters. Part 2-Elimination of ethyl picolinate and ethyl 1-methylpicolinate”, *J. Phys. Org. Chem.*, 2003, 16, 166-174. (F3-G23)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, María Victoria Roux, Manuel Temprado, Pilar Jiménez, Juan Zenón Dávalos, Rafael Notario, Ramón Guzmán-Mejía, Eusebio Juaristi, “Calorimetric and Computational Study of Thiacyclohexane 1-Oxide and Thiacyclohexane 1,1-Dioxide (Thiane Sulfoxide and Thiane Sulfone). Enthalpies of Formation and the Energy of the S=O Bond”, *J. Org. Chem.*, 2003, 68, 1762-1770. (F3-G23)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, Madhavi Mahavadi, Diana N. Zeiger, Dahlia Naqib, María Victoria Roux, Rafael Notario, Joel F. Liebman, “The Strain Energy of Perchlorocyclopropane is Small: It Might Even be Negative. A Density Functional Theory Study of Perhalocycloalkanes”, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2003, 95, 784-790. (F3-G23)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, James S. Chickos, Dorothea M. Hillesheim, Sergey P. Verevkin, María Victoria Roux, Manuel Temprado, Marta Segura, Rafael Notario, Douglas E. Demasters, Joel F. Liebman, “The energetics of the isomeric 1- and 2-naphthoic acids: context, quantum chemical calculations and thermochemical measurements”, *Molecular Physics*, 2003, vol.101, n°9, 1311-1318. (F3-G23)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, María Victoria Roux, Manuel Temprado, Pilar Jiménez, Juan Pérez-Parajón, Rafael Notario, “Thermochemistry of Furancarboxylic Acids”, *J. Phys. Chem. A*, 2003, 107, 11460-11467. (F3-G23)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, G. Ávila, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero, “The rotational Raman spectra and cross sections of H₂O, D₂O and HDO”, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2003, 220, 259-275. (F3-G29)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, G. Ávila, G. Tejeda, J. M. Fernández, S. Montero, “The Raman spectra and cross-sections of the ν_2 band of H₂O, D₂O, and HDO”, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2003, 223, 166-180. (F3-G29)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, María del Carmen Fernández-Alonso, Juan Luis Asensio, Francisco J. Cañada, Jesús Jiménez-Barbero, Gabriel Cuevas, “G₂ and DFT Rigorous Description of the Inversion Process of Oxane and Thiane used as Simple Ring Systems to Model Sugar Components”, *ChemPhysChem*, 2003, 4, 754-757. (F3-G33)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, P. Vielva, E. Martínez-González, J. E. Gallegos, L. Toffolatti, J. L. Sanz, “Point source detection using the Spherical Mexican Hat Wavelet on simulated all-sky Planck maps”, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 2003, 344, 89-104. (F4-G44)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, E. Fuente, J. A. Menéndez, M. A. Díez, D. Suárez, M.A. Montes-Morán, “Infrared Spectroscopy of Carbon Materials: A Quantum Chemical Study of Model Compounds”, *J. Phys. Chem. B*, 2003, 107, 6350-6359. (F4-G51)
- **CSIC, ARTIGO PUBLICADO**, E. Fuente, J. A. Menéndez, D. Suárez, M. A. Montes-Morán, “Basic Surface Oxides on Carbon Materials: A Global View”, *Langmuir*, 2003, 19, 3505-3511. (F4-G51)
- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, V. Cruz, J. Ramos, A. Muñoz-Escalona, P. Lafuente, B. Peña, J. Martínez-Salazar, “3D-QSAR analysis of metalloccene-based catalysts used in ethylene polymerisation”, *Polymer*, 2003. (F4-G50)
- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, D. Cappelletti, E. Carmona-Novillo, F. Pirani, “Photodynamics of clusters of the major components of the atmosphere”, *International Journal of Photoenergy*, 2004. (F1-G13)

- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, R. Prosimiti, S. López-López, A. García-Vela, “Potential energy surface and ro-vibrational states of the ground Ar-HI complex”, *J. Chem. Phys.*, 2004. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, Rita Prosimiti, Á. Valdés, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, “Three-Dimensional Ab initio Potential and ground state dynamics of HeI2 complex”, *J. Phys. Chem.*, 2004. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, Ibon Alkorta, Oscar Picazo, José Elguero, “Chiral discrimination and isomerization processes in monomers, dimers and trimers of sulfoxides and thioperoxides”, *Tetrahedron: Asymmetry*, 2004. (F1-G10)
- **CSIC, ARTIGO IN PRESS**, Rafael Escribano, Ismael K. Ortega, Rafael G. Mosteo, Pedro C. Gómez, “The Br-O bond in halogen oxides. Empirical force constants and electronic characteristics”, *Canadian Journal of Chemistry*, 2004. (F2-G24)
- **CSIC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, S. López-López, R. Prosimiti, A. García-Vela, “UV Photolysis of Ar-HI cluster”, *J. Chem., Phys.*, 2004. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, Á. Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, “Additive three-body intermolecular potential for He2-Br2 complex”, *J. Chem. Phys.*, 2004. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, Á. Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, H-J. Werner, “Ab Initio calculations of potential surface of the B state HeI2 complex”, *J. Chem. Phys.*, 2004. (F1-G6)
- **CSIC, ARTIGO**, María del Carmen Fernández-Alonso, Karina Martínez-Mayorga, Vanessa Reyna-Aragón, Julio César Cárdenas-Rodríguez, Delia Quintana-Zavala, Jesús Jiménez-Barbero, Gabriel Cuevas, “Are the Changes of One Bond IJC-H Coupling Constants an Index of Stereoelectronic Manifestation ”, 2003.(F3-G33)
- **CSIC, ARTIGO**, P. Vielva, E. Martínez-González, R.B. Barreiro, J.L. Sanz, L. Cayón, “Detection of non-Gaussianity in the WMAP 1-year data using spherical wavelets”, 2003.(F4-G44)
- **CSIC, CAPÍTULO DE LIBRO**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, D. Cappelletti, E. Carmona-Novillo, E.Cornicchi, M. Moix-Teixidor, M. Sabido, F. Pirani, “Molecular Beam Scattering Experiments of Species of Atmospheric Relevance: Potential Energy Surfaces for Clusters and Quantum Mechanical Prediction of Spectral Features” in *Weakly interacting Molecular Pairs: Unconventional Absorbers of Radiation in the Atmosphere*. Editors: C. Camy-Peyret and A. A. Vigasin, Kluwer Academic Publishers, (Boston/Dordrecht/London), 2003, 169-182. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, R. Prosimiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, “Structures and Energetics of H+n Clusters with n=5-11”, TMR THEONEHTII meeting, Bologna (Italia), 2003, noviembre. (F1-G6)
- **CSIC, CONGRESO**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, D. Cappelletti, E. Carmona-Novillo, F. Pirani, “Photodynamics of Clusters for the Major Components of the Atmosphere”, 7th International Conference on Solar Energy and Applied Photochemistry (SOLAR 03), 2003, Luxor (Egipto), 23-28 febrero. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, D.Cappelletti, M. Bartolomei, F. Pirani, V. Aquilanti, “Collisional Alignment of Ethane, Ethylene and Acetylene Molecules by Molecular Beam Scattering Experiments”, XX Symposium on Molecular Beams, 2003, Lisboa (Portugal), 8-13 xuño. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, D.Cappelletti, M. Bartolomei, F. Pirani, F. Thibault, “A new potential Energy Surface for the Acetylene-Argon Weakly Bound Complex”, XX Symposium on Molecular Beams, 2003, Lisboa (Portugal), 8-13 xuño. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, D.Cappelletti, E. Carmona-Novillo, F. Pirani, “Molecular beam measurements of van der Waals forces: dynamics of clusters of the atmospheric gases”, XX Symposium on Molecular Beams, 2003, Lisboa (Portugal), 8-13 xuño. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, V. Aquilanti, M. Bartolomei, D.Cappelletti, F. Pirani, F. Thibault, “Collisional Studies with Molecular Beams Containing Acetylene, Ethylene and Ethane: Molecular Alignment and Potential Energy Surfaces”, COMET XVIII-XVIII International Conference on Molecular Energy Transfer, 2003, San Lorenzo del Escorial (España), 15-20 xuño. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, M. Bartolomei, M. I. Hernández, J. Campos Martínez, “Time-dependent wave packet investigations for H2-H2 collisions”, Annual Meeting of the RTN European Network ‘Potential

Energy Surfaces for Molecular Spectroscopy and Dynamics', 2003, Bertinoro, FO (Italia), 19-23 noviembre. (F1-G13)

- **CSIC, CONGRESO**, M. Bartolomei, M. I. Hernández, J. Campos Martínez, "Quantum mechanical simulations of H₂-H₂ collisions", 1º Congreso Nacional de Astrofísica Molecular, 2003, Ciudad Real (España), 1-4 diciembre. (F1-G13)
- **CSIC, CONGRESO**, Jesús Jiménez-Barbero et al. , "Computational insights on the molecular recognition processes between carbohydrates and proteins. A comparison with NMR experimental observations", 2003.(F3-G33)
- **CSIC, CONGRESO**, María del Carmen Fernández, Gabriel Cuevas, Francisco Javier Cañada, Juan Luis Asensio, Jesús Jiménez, "Interacciones proteína-carbohidrato: estudio teórico de los requisitos energéticos para la distorsión de anillos de tipo piranosa y origen de las interacciones carbohidrato-anillo aromático", 2003.(F3-G33)
- **CSIC, CONGRESO**, Víctor L. Cruz, Javier Ramos, Antonio Muñoz-Escalona, Javier Martínez-Salazar, "Application of 3D-QSAR to the study of metallocene-based catalyst polymerization", The 226th ACS National Meeting, New York, 2003, 7-11, setembro. (F4-G50)
- **CSIC, CONGRESO**, J. Ramos, V. Cruz, A. Muñoz-Escalona, S. Martínez, J. Martínez-Salazar, "Estudios computacionales de catalizadores a-diimina de níquel para la polimerización de etileno", GEP 2003 Avances en materiales polímeros, Tarragona, 2003, 14-17 setembro. (F4-G50)
- **CSIC, CONGRESO**, S. Martínez, V. Cruz, A. Muñoz-Escalona, J. Ramos, J. Martínez-Salazar, "Estudio teórico de la copolimerización de etileno-estireno mediante la utilización de catalizadores tetanocenos "half-sandwich" y sistemas etilenbis (tetrahidroindenilo) MCI₂ (M=Ti, Zr)", GEP 2003 Avances en materiales polímeros, Tarragona, 2003, 14-17 setembro. (F4-G50)
- **CSIC, CONGRESO**, M. A. Montes-Morán, D. Suárez, J. A. Menéndez, E. Fuente, "On the nature of basic sites on carbon surfaces: an overview", Carbón'03, Oviedo, 2003, xullo. (F4-G51)
- **CSIC, TESE EN PROCESO**, Sonia Martínez, "Modelización molecular de catalizadores de centro activo único para la copolimerización de etileno-estireno", 2004. (F4-G50)

Producción científica declarada por grupos de trabajo da UDC:

- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, P. Barral, A. Bermúdez, M. C. Múñiz, M. V. Otero, P. Quintela, P. Salgado, "Numerical simulation of some problems related to aluminium casting", J. Mater. Process. Technol., 2003, vol. 142, nº2, 383-399. (F2-G-18)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, Carlos Platas-Iglesias, David Esteban, Vicente Ojea, Fernando Avecilla, Andrés de Blas, Teresa Rodríguez-Blas, "Templating Schiff-Base Lateral Macrobicycles: An Experimental and Theoretical Structural Study of the Intermediates", Inorganic Chemistry, 2003, vol. 42, nº 14, 4299-4307. (F1-G5)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, M.E.D. Azenha, H.D.Burrows, M. Canle L., R. Coimbra, M. I. Fernández, M. V. García, A. E. Rodrigues, J. A. Santaballa, S. Steeken, "On the kinetics and energetics of one-electron oxidation of 1,3,5-triazines", Chem. Commun., 2003, 112-113. (F3-G34)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, Jayanta Kumar Ray, Bidhan Chandra Roy, Dipanjan Pan, M. Canle L., J.A. Santaballa, José Mahía, "14-n-Butyldibenz[a,h] acridine", Acta. Cryst. E, 2003, 59, o514-o516(F3-G34)
- **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, "Kinetic and Mechanistic aspects of the Direct Photodegradation of Atrazine, Atraton, Ametryn and 2-Hydroxy-Atrazine by 254 nm light in Aqueous Solution", J. Phys. Org. Chem., 2003, 16, 498-503. (F3-G34)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, J. Andrés, X.L. Armesto, M. Canle L., M. V. García, D.R. Ramos, J. A. Santaballa, "Understanding the mechanism of base-assisted decomposition of (N-halo), N-alkylalcoholamines", Org. & Biomol. Chem., 2003, 1, 4323-4328. (F3-G34)

- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, Carlos Platas-Iglesias, David Esteban, Vicente Ojea, Fernando Avecilla, Andrés de Blas, Teresa Rodríguez-Blas, “Templating Schiff-Base Lateral Macrobicycles: An Experimental and Theoretical Structural Study of the Intermediates”, *Inorganic Chemistry*, 2003, vol.42, nº14, 4299-4307. (F4-G46)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, María Ruiz, M. Carmen Fernández, Aniana Díaz, José M. Quintela, Vicente Ojea, “Diastereoselective Synthesis of 2-Amino-4-phosphonobutanoic Acids by Conjugate Addition of Lithiated Schöllkopf’s Bislactim Ethers to Vinylphosphonates”, *J. Org. Chem.* 2003, 68, 7634-7645. (F4-G46)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, María Ruiz, Vicente Ojea, Susana Conde, José M. Quintela, “Diastereoselective Synthesis of 3-Phosphonomethyl-substituted Cyclohexyl- and Cyclohex-2-enylglycines”, *Synlett*, 2003, nº5, 689-693. (F4-G46)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, J. M. Amado, J.C.Álvarez, A. J. López, G. Nicolás, J. A. Pérez, A. Ramil, E. Saavedra, J. Sanesteban, M.J.Tobar, A. Yáñez, “Modelización y monitorización de procesos de refusión láser de recubrimientos depositados por plasma”, *Revista de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*, 2004, vol.43, nº2, marzo-abril. (F4-G48)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, J. A. Becerra et al., “Multimodule Artificial Neural Network Architectures for Autonomous Robot Control Through Behaviour Modulation”, *Artificial Neural Nets Problem Solving Methods*, Springer-Verlag, 2003. Lecture notes in Computer Science, vol.2687, 169-176. (F4-G52)
- **UDC, ARTIGO PUBLICADO**, J. A. Becerra et al., “Some Approaches for Reusing Behaviour Based Robot Cognitive Architectures Obtained Through Evolution”, *Biologically Inspired Robot Behaviour Engineering*, Physica-Verlag Heidelberg, 2003, febrero, 239-260. (F4-G52)
- **UDC, ARTIGO ENVIADO**, Carlos Platas-Iglesias, Marta Mato-Iglesias, Kristina Djanashvili, Robert N. Muller, Luce Vander Elst, Joop A. Peters, Andrés de Blas, Teresa Rodríguez-Blas, “Lanthanide Chelates Containing Pyridine Units with Potential Application as Contrast Agents in MRI”, 2003. (F1-G5)
- **UDC, ARTIGO ENVIADO**, Enrique Castillo, Noelia Sánchez-Marroño, Amparo Alonso-Betanzos, Oscar Fontela-Romero, Carmen Castillo, “Functional and Neural Networks based on Dimensional Analysis”, *Journal of Machine Learning Research*, 2003. (F1-G1)
- **UDC, ARTIGO ENVIADO**, Marcelino Fuentes, “Limited dispersal and the robustness of the unified neutral theory of biodiversity”, *Theoretical Population Biology*, 2003.(F1-G4)
- **UDC, ARTIGO ENVIADO**, A. Bermúdez, M.V. Otero, “Numerical solution of a three-dimensional solidification problem in aluminium casting”, *Finite Elem. Anal. Des.*, 2003.(F2-G18)
- **UDC, ARTIGO ENVIADO**, M. Canle L., M. I. Fernández, J. A. Santaballa, “Developments on the Mechanism of Photodegradation of Triazine-Based Pesticides”, *J. Phys. Org. Chem.*, 2003. (F3-G34)
- **UDC, ARTIGO**, Ingrid Bárcena, José Antonio Becerra, Joan Cambras, Richard Duro, Carlos Fernández, Javier Fontán, Ignacio López, Caterina Parals, José Carlos Pérez, Juan Villasuso, “A Grid Supercomputing Environment for High Demand Computational Applications”, 2003. (F4-G52)
- **UDC, CONGRESO**, X. L. Armesto, M.Canle, M.V. García, C. Obinger, D. Rodríguez, J. A. Santaballa, “Myeloperoxidase-mediated chlorination: the quest for the active species”, 9th European Symposium on Organic Reactivity, Oslo (Noruega), 2003, 12-17 xullo. (F3-G34)
- **UDC, CONGRESO**, G. L. Taboada, J. Touriño, R. Doallo, “Performance Modeling and Evaluation of Java Message-Passing Primitives on a Cluster”, *EuroPVM/MPI 2003*, Venecia (Italia), 2003, outubro. (F4-G47)
- **UDC, CONGRESO**, G. L. Taboada, J. Touriño, R. Doallo, “Performance Analysis of Java Message-Passing Libraries on Fast Ethernet, Myrinet and SCI Clus”, *IEEE International Conference on Cluster Computing*, Cluster 2003, Hong Kong, 2003, decembro. (F4-G47)
- **UDC, CONGRESO**, G. L. Taboada, J. Touriño, R. Doallo, “Configuración y Evaluación de Bibliotecas de Paso de Mensajes Java en Clusters”, *Jornadas de Paralelismo*, Leganés, 2003, setembro. (F4-G47)

- **UDC, CONGRESO**, J. Sanesteban, E. Saavedra, A. Ramil, A.J. López, C. Álvarez, J. M. Amado, M.J. Tobar, A. Yáñez, G. Nicolás, “Desarrollo de un modelo de endurecimiento de aceros por láser”, XXIX Bienal de Física y Química, Madrid, 2003, 7-11 xullo. (F4-G48)
- **UDC, CONGRESO**, A. Yáñez, J. M. Amado, C. Álvarez, G. Nicolás, A. J. López, J.A. Pérez, A. Ramil, E. Saavedra, J. Sanesteban, M.J. Tobar, “Modelling of the surface properties in laser heat treatments”, 7th Internacional Research/Expert Conference ‘Trends in the development of Machinery and Associated Technology’ TMT 2003, Lloret de Mar (Girona), 2003, 15-16 setembro. (F4-G48)
- **UDC, CONGRESO**, A. Yáñez et al., “Optimización de parámetros en el tratamiento térmico superficial de materiales metálicos con láser”, II Congreso Ibérico de Tribología, Valencia, 2003, 24-25 setembro. (F4-G48)
- **UDC, CONGRESO**, A. J. Yáñez, J. M. Amado, J. C. Álvarez, A. J. López, G. Nicolás, A. Ramil, E. Saavedra, J. Sanesteban, M. J. Tobar, “Optimización del recorrido y de la potencia de un haz láser de CO₂ en el tratamiento térmico de válvulas de motores diesel”, IX Congreso de Ciencia y Tecnología Metalúrgicas (CTM 2003), Madrid, 2003, 23-25, outubro. (F4-G48)
- **UDC, CONGRESO**, A. J. Yáñez, J. C. Álvarez, E. Saavedra, J. Sanesteban, J. M. Amado, A. J. López, A. Ramil, M. J. Tobar, G. Nicolás, “Modelización de las transformaciones de fase en el proceso de endurecimiento de aceros con láser de CO₂”, IX Congreso de Ciencia y Tecnología Metalúrgicas (CTM 2003), Madrid, 2003, 23-25 outubro. (F4-G48)
- **UDC, CONGRESO**, I. Bárcena, J. A. Becerra, J. Cambras et al., “Entorno de supercomputación Grid para aplicaciones de altas demandas computacionales”, Boletín de RedIRIS, nº66-67, decembro 2003-xaneiro 2004. (F4-G52)
- **UDC, TESE DOUTORAL**, José Antonio Becerra Permy, “Aproximación Evolutivas para la obtención incremental de Arquitecturas Modulares de Comportamientos en Robots Autónomos”, Universidade da Coruña, 2003, outubro. (F4-G52)
- **UDC, TESE DOUTORAL**, Tania María Ruanova Suárez, “Síntesis de iminoazúcares a partir de éteres de bislactima y derivados de treosa, ribosa y eritrosa”, Universidade da Coruña, 2003. (F4-G46)
- **UDC, TESE DOUTORAL EN PROCESO**, Noelia Sánchez Maroño, “Algoritmos de aprendizaje, reducción de la dimensionalidad y análisis de sensibilidad par redes funcionales y neuronales”, 2003. (F1-G1)
- **UDC, TESE DOUTORAL EN PROCESO**, Marta Mato Iglesias, “Complejos de los Lantánidos con Potenciales Aplicaciones Tecnológicas”, Universidade da Coruña, 2003.(F1-G5)
- **UDC, TESE DOUTORAL EN PROCESO**, Marina González-Lorenzo, “Complejos de los Lantánidos con Receptores Macrocíclicos”, Universidade da Coruña, 2003. (F1-G5)
- **UDC, TESE DOUTORAL EN PROCESO**, Victoria Otero, “Estudio matemático y resolución numérica de modelos que surgen en el estudio de una colada de aluminio”, Universidade da Coruña, 2004(F2-G18)
- **UDC, TESE DE DOUTORAMENTO EN PROCESO**, Luis F. Rodríguez Vázquez, “Reacciones de cloración de compostos nitroxenados”, Universidade da Coruña, 2004. (F3-G34)
- **UDC, TESE DE DOUTORAMENTO EN PROCESO**, Manuel A. Peiteado Peiteado, “Fotodegradación de compostos relacionados coa estrutura da anilina e a familia das triazinas”, Universidade da Coruña, 2004. (F3-G34)
- **UDC, TESE DE DOUTORAMENTO EN PROCESO**, Daniel Rodríguez Ramos, “Caracterización cinética e computacional da acción oxidante do sistema enzimático mieloperoxidasa/peróxido de hidróxeno/ion cloruro”, Universidade da Coruña, 2004. (F3-G34)
- **UDC, TESE DE DOUTORAMENTO EN PROCESO**, Antonio Freire Corbacho, “Degradación química e fotoquímica de pesticidas derivados das sulfonilureas”, Universidade da Coruña, 2006. (F3-G34)
- **UDC, TESE DE LICENCIATURA**, María Fernández González, “Oxidación ‘in vitro’ de bases pirimidínicas: estudio experimental y teórico de la oxidación de la timina”, Universidade da Coruña, 2003, xullo. (F3-G34)

- **UDC, PROXECTO FIN DE CARREIRA**, Jacobo Tarrío Barreiro, “Diseño e Implementación de un Portal basado en Tecnologías Grid para el Acceso a Recursos de Supercomputación”, Universidade da Coruña, 2003, xullo. (F4-G47)
- **UDC, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN**, Armando Yáñez et al., “Modelización, monitorización y control de tratamientos térmicos superficiales de materiales metálicos con láser”, Ministerio de Ciencia y Tecnología, 2003. (F4-G48)
- **UDC, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN**, Armando Yáñez et al. “Recubrimientos cerámicos de aceros con láser de CO₂”, Xunta de Galicia, 2003. (F4-G48)

Producción científica declarada por grupos de traballo da USC:

- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, José Manuel Seco, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, “A practical guide for the assignment of the absolute configuration of alcohols, amines and carboxylic acids by NMR”, Tet. Asymmetry, 2002, 12, 2915-2925. (F1-G7)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, Rosa García, J. Manuel Seco, Saulo A. Vázquez, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, “Absolute Configuration of Secondary Alcohols by H-NMR: In situ Complexation of MPA esters with Barium (II)”, J. Org. Chem., 2002, vol.67, nº13, 4579-4589.(F1-G7)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, J. Manuel Seco, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, “Incorret procedure for the assignment of the absolute configuration of carbocleosides by NMR. MPA must not be used with primary alcohols”, Tet. Asymmetry, 2002, 13, 919-921.(F1-G7)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, J. M. Seco, E. Quiñoá, R. Riguera, “The Assignment of Absolute Configuration by NMR”, Chem. Rev., 2004, 104, 17-118. .(F1-G7)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, F. Gómez, A. Iglesias, R. Lobato, J. Mosquera, J. Pardo, J. Pena, A. Pazos, M. Pombar, A. Rodríguez, “A two dimensional position secsitive gas chamber with scanned charge transfer readout”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2003, A 512, 470-475. (F2-G15)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, F. Gómez et al., “DIRAC: A high resolution spectrometer for pionium detection”, Dirac collaboration, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2003, A 515, 467-496. (F2-G15)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, “Computational Study of the Interaction in X-(CH₃NH₂)_n Clusters (X= F, Cl; n=1-4). The Balance between Ino-Molecule and Molecule-Molecule Interactions”, J. Phys. Chem. A, 2003, 107, 10184-10190. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, “Evaluation of Magnetic Properties as a Criterion for the Elucidation of the Pseudopericyclic Character of 1,5-Electrocyclizations in Nitrile Ylides”, J. Phys. Chem. A, 2003, 107, 4962-4966. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, “Ab initio MP2 and DFT Study of the Thermal Syn Elimination Reaction in Ethyl Formate”, J. Phys. Chem. A, 2003, 107, 1651-1654. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, Ángeles Peña-Gallego, “DFT Study of Pericyclic and Pseudopericyclic Thermal Cheletropic Decarbonylations. Evaluation of Magnetic Properties”, J. Org. Chem., 2003, 68, 8823-8830. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, A. Bermúdez, J. Bullón, F. Pena, P.Salgado, “A numerical method for transient simulation of metallurgical compound electrodes”, Finite Elem. Anal. Des., 2003, vol.39, nº 4, 283-299. (F2-G18)

- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, A. Bermúdez, R. Rodríguez, P. Salgado, “ Numerical analysis of the electric field formulation of an eddy current problem”, C. R. Acad. Sci. Paris., 2003, Série I, vol. 337, 359-364. (F2-G18)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, M. N. Lorenzo, M. A. Santos, V. Pérez-Muñuzuri, “Spatiotemporal Stochastic forcing effects in an ensemble consisting of arrays of diffusively coupled Lorenz cells”, Chaos: An interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 2003, vol.13, nº3, 913-920. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, V. Pérez-Muñuzuri, M.N. Lorenzo, P. Montero, K. Fraedrich, E. Kirk, F. Lunkeit, " Response of a global atmospheric circulation model to spatio-temporal stochastic forcing: Ensemble statistics”, Nonlinear processes in Geophysics, 2003vol.10, nº6, 453-462. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, M.J. Souto, C.F. Balseiro, V. Pérez-Muñuzuri, M.Xue, K. Brewster, “Impact of Cloud Analysis on Numerical Weather Prediction in the Galician Region of Spain”, Journal of Applied Meteorology, 2003, 42, 129-140. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, C. F. Balseiro, P. Carracedo, B. Gómez, P. C. Leitão, P. Montero, L. Naranjo, E. Penabad, V. Pérez-Muñuzuri, “Tracking the ‘Prestige’ oil spill. An operational experience en simulation at MeteoGalicia”, Weather, 2003, 58, 452-458. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, P. Montero, J. Blanco, J. M. Cabanas, J. Maneiro, Y. Pazos , A. Moróño, C. F. Balseiro, P. Carracedo, B. Gómez, E. Penabad, V. Pérez-Muñuzuri, F. Braunschweig, R. Fernades, P. C. Leitão, R. Neves, “Oil spill Monitoring and Forecasting en the Prestige-Nassau accident”, en Proceedings 26th Arctic and Marine Oilspill Program (AMOP) Technical Seminar, 2003, 2, 1013-1029. Enviroment Canadá, Ottawa (Canadá), 2003. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, B. Hervella, C.F. Balseiro, V. Pérez-Muñuzuri, “High resolution terrain as a triggering mechanism for the Kain-Frich scheme for the 8-10th September 2002. MEDEX case”, Proceedings of the 5rd EGS Plinius Conference, Ajaccio (Francia), 2003, outubro. (F2-G19)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, R. Antunes Nóbrega et al., “LHCb Technical Design Report: Reoptimized Detector, Design and Performance”, CERN-LHCC-2003-030, LHCb-TDR-9, 2003, 127 pp. (F2-G25)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, R. Antunes Nóbrega et al. ,”LHCb Trigger System: Technical Design Report”, CERN-LHCC-2003-031, LHCb-TDR-10, 2003, 80 pp. (F2-G25)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, David Rodríguez, Armando Navarro-Vázquez, Luis Castedo, Domingo Domínguez, Carlos Saá, “Cyclic Allene Intenediates in Intramolecular Dehydro Diels-Alder Reactions: Labeling and Theoretical Cycloaromatization Studies”, J. Org. Chem., 2003, 68, 1938-1946. (F3-G28)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, J. Álvarez-Muñiz, E. Marqués, R. A. Vázquez, E. Zas, “Energy determination of extensive air showers through the fluorescence technique”, Phys. Rev. D, 2003, 67, 101303. (F3-G37)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, V. Pardo, M. Iglesias, D. Baldomir, J. Castro, J. E. Arias, “Geometry optimization and electronic structure of BaCoO₃”, Solid State Communications, 2003, 128, 101-106. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, J. López Caheiro, M.Iglesias, V.Pardo, D. Baldomir, J. E. Arias, “Possible Spin Configurations and Magnetism in BaCoO₃ Perovskite”, International Journal of Quantum Chemistry, 2003, 91, 252-256. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, M.Pereiro, D. Baldomir, “Solution of Problem 10912”, American Mathematical Monthly, 2003, Vol.110, nº8, 744-745. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, M. Pereiro, D. Baldomir, S. Man’kovsky, J. Arias, “Ab Initio Calculations of Magnetic Properties of Fe-Cr Trilayer as a Function of Ferromagnetic Slab Thickness”, International Journal of Quantum Chemistry, 2003, 91, 245-251. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, M. Pereiro, D. Baldomir, S. Man’kovsky, “Thickness-Dependent Interface Magnetism of Fe/Cr/Fe Trilayers”, International Journal of Quantum Chemistry, 2003, 91,234-238. (F3-G38)

- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, K. Warda, L. Wojtczak, G. Wiatrowski, D. Baldomir, M. Pereiro, J. E. Arias, "Magnetoresistance for thin multilayers", *Phys. Stat. Sol. (a)*, 2003, vol. 196, n°1, 117-120. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, F. Fernández, X. García-Mera, J.E. Rodríguez-Borges, M.L.C. Vale, "The exo-selectivity of the new non-natural chiral auxiliary: (+)-(1 R, endo)-2-benzonorbornenol en an asymmetric aza-Diels-Alder reaction", *Tetrahedron Letters*, 2003, 44, 431-433. (F3-G39)
- **USC, ARTIGO PUBLICADO**, S-W. Yao, V.H.C.Lopes, F.Fernández, X. García-Mera, M.Morales, J.E. Rodríguez-Borges, M.N.D.S. Cordeiro, "Synthesis and QSAR study of the anticancer activity of some novel indane cabocyclic nucleosides", *Bioorganic Medicinal Chemistry*, 2003, vol.11, n°23, 4999-5006. (F3-G39)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, David Rodríguez, María Fernanda Martínez-Esperón, Armando Navarro-Vázquez, Luis Castedo, Domingo Domínguez, Carlos Saá, "Intramolecular Dehydro Diels-Alder Reactions of Diarylacetylenes: Switching between Benzo[b]- and Benzo[c] fluorenones as Products by Controlling the Rearrangement of Cyclic Allene Intermediates", *Journal of Organic Chemistry*, 2003.(F3-G28)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, Fredy Sussman, Antonio Rumbo, M. Carmen Villaverde, Antonio Mouriño, "Predicting the Cell Differentiation Activity of 1 a,25-Dihidroxyvitamin D3 Side Chain Analogues from Docking Simulations", *J. Med. Chem.*, 2003. (F3-G27)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, Yolanda Pazos, Victoria Leiro, José M. Seco, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, "BOC-Phenylglycine: A Chiral Slovating Agent for the Assignment of the Absolute Configuration of Amino Alcohols and their Ethers by NMR", *J.Org. Chem.*, 2004. (F1-G7)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, V. Pardo, P. Blaha, M. Iglesias, D. Baldomir, J. E. Arias, "Magnetic structure and orbital ordering in BaCoO3 from first-principles calculations", *Physical Reviews*, 2003. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, L. Cazón-Boado, R. A. Vázquez, A. A. Watson, E. Zas, "Time structure of muons en air showers", *Astropart. Phys.*, 2003. (F3-G37)
- **USC, ARTIGO ENVIADO**, F.Fernández, X. García-Mera, J.E. Rodríguez-Borges, M.N.D.S. Cordeiro, V.H.C.Lopes, J. E. Magalhaes, "Synthesis and Theoretical Study of the Reaction between Cyclopentadiene and Protonated, Benzylimine Derivatives fron Glyoxilates", *Tetrahedron*, 2003. (F3-G39)
- **USC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, Félix Freire, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, "The Assignment of Absolute Stereochemistry of Primary/Secondary Diols Systems by NMR", 2004. (F1-G7)
- **USC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, Félix Freire, José M. Seco, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, "The Assignment of Absolute Stereochemistry of Primary/Secondary Diols by NMR", 2004. (F1-G7)
- **USC, ARTIGO EN PREPARACIÓN**, Rosa García, José M. Seco, Emilio Quiñoá, Ricardo Riguera, " The 1H-NMR assignment of Absolute Configuration of a-chiral Primary Amines by Complexation of their MPA derivatives with Barium (II)", 2004. (F1-G7)
- **USC, ARTIGO**, G.Wiatrowski, D. Baldomir, K. Warda, M. Pereiro, L. Wojtczak, J. E. Arias, "Magnetization depth profiles in trilayer systems with mixed-spin interfaces-a contribution to temperature dependent GMR-potentials", 2003. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero,"Dissociation of H-X acids (X=F, Cl, Br,I) in methanil. A computational study", 2003. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, "Computational study of the interaction in (CH3)2X dimer and trimer (X=O, S), 2003. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, "Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters", 2003. (F2-G20)
- **USC, ARTIGO**, A. Bermúdez, J.L. Ferrín, A. Prieto, "A finite element solution of acoustic propagation in porous media", 2003. (F2-G21)
- **USC, ARTIGO**, K. Warda, L. Wojtczak, G. Wiatrowski, D. Baldomir, M. Pereiro, J. E. Arias,"Giant magnetoresistance for thin multilayers", 2003. (F3-G38)

- **USC, ARTIGO**, M.Pereiro, D. Baldomir, “Magnetoresistance of nonmagnetic samples”, 2004. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO**, M. Pereiro, D. Baldomir, S. V. Man’kovsky, K. Warda, J. E. Arias, L. Wojtczak, J. Botana, “Layer potentials calculated from ab initio methods and GMR predictions in Fe/Cr”, 2004. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO**, D. Baldomir, M. Pereiro, “Magnetic Currents Through Quantum Points”, 2004. (F3-G38)
- **USC, ARTIGO**, D. Baldomir, M. Pereiro, “Geometrical information coded in Maxwell’s equations”, 2003. (F3-G38)
- **USC, CAPÍTULO DE LIBRO**, N. Montejo, M. N. Lorenzo, V. Pérez-Muñuzuri, V. Pérez-Villar, “Control of the behavior in a neuronal system with time-delay”, *Mathematical Modeling & Computing in Biology and Medicine*, V. Capasso Ed. ,2003, 127-133. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, Antonio Rodríguez Sampayo, Omar Licandro, “Scrapage Schemes for Durable Goods, Heterogeneity and Replacement Echoes”, XXVIII Simposio de Análisis Económico organizado pola Asociación Española de Economía, Universidade San Pablo Ceu, Sevilla, 2003, 11-13 decembro. (F1-G2)
- **USC, CONGRESO**, A. Rodríguez, F. Gómez, A. Iglesias, R. Lobato, J. Mosquera, J. Pardo, J. Pena, A. Pazos, M. Pombar, J. R. Sendon, “Operación de una matriz de cámaras de ionización líquida para verificación de parámetros de haz en radioterapia”, XIV Congreso nacional de Física Médica, 2003, Vigo (España), 17-20 xuño. (F2-G15)
- **USC, CONGRESO**, A. Bermúdez, R. Rodríguez, P. Salgado, “Resolución numérica de una formulación en campo eléctrico de las ecuaciones de Maxwell en baja frecuencia”, *Actas XVIII Cedy/VIII CMA*, J.M. Jornet et al. Eds. , CD-ROM, Universitat de Rovira i Virgili-SEMA. Tarragona, 2003. (F2-G18)
- **USC, CONGRESO**, Noelia Montejo, Nieves Lorenzo, Vicente Pérez-Muñuzuri, Vicente Pérez-Villar, “Spatiotemporal behavior in networks of Ca3 region in the hippocampus”, CNS’03 The Annual Computational Neuroscience Meeting, Alicante, 2003, publicado en Libro de abstracts of Twelfth Annual Computational Neuroscience Meeting, pp. 175. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, N. Montejo, M. N. Lorenzo, V. Pérez-Muñuzuri, V. Pérez-Villar, R. Rodríguez, “Synchronization in a neural network with stochastic forcing”, *Dynamics Days 2003*, Palma de Mallorca, 2003, publicado en Libro de abstracts. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, Noelia Montejo, Roger Rodríguez, Nieves Lorenzo, “Sincronización espacio-temporal en una red bidimensional”, XII Edición Física estadística 2003, Pamplona, 2003, publicado en Libro de resúmenes de XII Congreso “Física Estadística” (FISES 2003), pp. 118. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, C. F. Balseiro, E. Penabad, M. J. Souto, V. Pérez-Muñuzuri, L. Naranjo, M. Xue, K. Brewster, “Predicción meteorológica numérica operativa en Galicia usando el modelo numérico no hidrostático ARPS2”, 2º Congreso Cubano de Meteorología, La Habana (Cuba), 2003, marzo. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, C. F. Balseiro, P. Carracedo, B. Gómez, P.C. Leitão, P. Montero, L. Naranjo, E. Penabad, V. Pérez-Muñuzuri, “Modelling The Oil Spill Track From Prestige-Nassau Accident”, *European Geophysical Society (EGS) Joint Assembly*, Niza (Francia), 2003, abril. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, V. Pérez-Muñuzuri, R. Deza, K. Fraedrich, E. Kirk, F. Lunkeit, “Stochastic Resonance in a global atmospheric circulation model”, *European Geophysical Society (EGS) Joint Assembly*, Niza (Francia), 2003, abril. (F2-G19)
- **USC, CONGRESO**, Lucía González, Fredy Salomon Sussman, M. Carmen Villaverde, Ramón José Estévez, Juan Carlos Estévez, “Design of novel peptidic β -secretase (Memapsin-2) inhibitors”, 47th Annual Meeting of the Biophysical Society, San Antonio (USA), 2003, marzo, publicado en *Biophysical Journal*, vol.84, p.282 a. (F3-G27)
- **USC, CONGRESO**, F.Sussman, A. Rumbo, M.C. Villaverde, C. Rodríguez, M. Maestro, A. Mouriño, “Predicting the transcriptional activity of vitamin D side chain analogues from docking simulations”, 12th Workshop on Vitamin D, Maastricht (Países Baixos), 2003, xullo. (F3-G27)

- **USC, CONGRESO**, Lucía González-Louro, Fredy Sussman, M. Carmen Villaverde, Ramón J. Estévez, Juan C. Estévez, “Design of novel peptidic β -secretase (Memapsin-2) inhibitors”, XXIX Reunión Bial de la Real Sociedad Española de Química, Madrid, 2003, Xullo. (F3-G27)
- **USC, CONGRESO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, Ángeles Peña-Gallego, “Computational study of the dissociation of oxalic acid in water clusters. The role of a second carboxylic group”, XI International Congress of Quantum Chemistry 2003, University of Bonn (Germany), 2003, 20-26 xullo. (F2-G20)
- **USC, CONGRESO**, Enrique M. Cabaleiro-Lago, José M. Hermida-Ramón, Jesús Rodríguez-Otero, Ángeles Peña-Gallego, “Evaluation of magnetic properties as a criterion for the elucidation of the pseudopericyclic character of 1,5-electrocyclizations in nitrile ylides”, XI International Congress of Quantum Chemistry 2003, University of Bonn (Germany), 2003, 20-26 xullo. (F2-G20)
- **USC, CONGRESO**, E. Van Herwijnen et al., “DIRAC:Distributed Infrastructure with Remote Agent Control”, 2003 Conference for Computing in High Energy and Nuclear Physics, La Jolla, California (USA), 2003, 24-28 marzo. (F2-G25)
- **USC, CONGRESO**, David Rodríguez, María Fernanda Martínez-Esperón, Armando Navarro-Vázquez, Luis Castedo, Domingo Domínguez, Carlos Saá, “Reacciones deshidro Diels-Alder intramoleculares: transposiciones de alenos cíclicos”, XXIX Reunión Bial de la Real Sociedad Española de Química (Centenario 1903-2003), Madrid, 2003, xullo.(F3-G28)
- **USC, CONGRESO**, J. Álvarez-Muñiz, E. Marqués, R. A. Vázquez, E. Zas, “Implications of the angular spread of air shower particles for the fluorescence technique”, 28th International Cosmic Ray Conference, Tsukuba (Japón), 2003, p.623. (F3-G37)
- **USC, CONGRESO**, J. Álvarez-Muñiz, E. Marqués, R. A. Vázquez, E. Zas, “Radio pulses generated by showers in different dense media”, 28th International Cosmic Ray Conference, Tsukuba (Japón), 2003, p.1521. (F3-G37)
- **USC, CONGRESO**, D. González-Díaz, R. A. Vázquez, E. Zas, “Neutrinos from cosmological cosmic rays”, 28th International Cosmic Ray Conference, Tsukuba (Japón), 2003, p.1443. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, V. Canoa, N. Armesto, C. Pajares, R. A. Vázquez, “Collective behaviour in nuclear interactions and shower development”, 28th International Cosmic Ray Conference, Tsukuba (Japón), 2003, p.1619. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, L.Cazón-Boado, R. A. Vázquez, A. A. Watson, E. Zas, “Analytical time structure of muonic showers”, 28th International Cosmic Ray Conference, Tsukuba (Japón), 2003, p.559. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, J. E. Rodríguez-Borges, M.L.C. Vale, T. Pacheco, S. Girão, C. Teixeira, F. Fernández, X. García-Mera, “Efecto cooperativo en reacciones de aza-diels-alder asimétricas usando dos auxiliares quirales”, XIII Congreso Nacional SEQT, Santiago de Compostela, 2003, 9-12- setembro. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, M.M. Morales, F. Fernández, X. García-Mera, J. Rodríguez-Ojea, L.J. Vilariño, “Síntesis de nuevos carbonucleósidos derivados de 3-(6-arilpurin-9-ilmetil)-1-indanol”, XIII Congreso Nacional SEQT, Santiago de Compostela, 2003, 9-12- setembro. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, Melvin M. Morales, Xerardo García-Mera, Olga Caamaño, Marcos D. García, “Síntesis y estudio QSAR de la actividad citostática de nuevos carbonucleósidos derivados del indano”, Reunión de ácidos nucleicos y nucleósidos (RANN IV), Granada, 2003, 6-8 novembro. (F3-G39)
- **USC, CONGRESO**, Francisco Meijide, Pedro Ramos-Cabrer, Julio A. Seijas, Haydée Ulloa, “ β -cyclodextrin Complexes With Phenols: An NMR-Molecular Modelling Study”, The 9th Electronic Computational Chemistry Conference, 2003, 1-31 marzo. (F4-G45)
- **USC, TESE DOUTORAL**, Antonio Rodríguez Sampayo, “Un análisis del reemplazo de activos físicos: Aplicación al consumo de bienes duraderos”, Universidade de Santiago, 2003, 15 setembro.(F1-G2)

- **USC, TESE DOUTORAL EN PROCESO**, Yolanda Piñeiro Redondo, “Sen título, desenvolvemento dunha simulación Monte Carlo que xenere un xel físico a partir dun sistema de cadeas liñeais de polímeros, nun disolvente de calidade termodinámica variable”, Universidade de Santiago, 2004.(F2-G-16)
- **USC, TESE DE LICENCIATURA**, Jorge Ojea Rodríguez, “Nuevos análogos carbonucleosídicos derivados del indanol con potencial actividad biológica”, Universidade de Santiago, 2003, outubro. (F3-G39)
- **USC, TESE DE LICENCIATURA**, Leonardo Javier Vilariño Espasandín, “Contribución a la síntesis de carbonucleosidos derivados del indanol”, Universidade de Santiago, 2003, outubro. (F3-G39)
- **USC, TESINA**, Javier Pena, “Simulación Monte Carlo dun acelerador liner Siemens Primus para radioterapia”, Universidade de Santiago, 2003, novembro. (F2-G15)
- **USC, TESINA**, Juan Pardo, “Desenvolvemento dun detector líquido de ionización con aplicacións en radioterapia”, Universidade de Santiago, 2003. (F2-G15)
- **USC, TRABALLO TERCEIRO CICLO EN PREPARACIÓN**, José Antonio Álvarez Dios, Gerardo Casal Urcera, “Una variante en s-bloques del algoritmo de la Doble Serie Ortogonal”, Universidade de Santiago de Compostela, 2004. (F1-G9)
- **USC, PROXECTO FIN DE CARREIRA**, Mercedes Montero Campillo, “Estudio del mecanismo de reacción de s-EZ-diformilcetena con formamida mediante cálculos mecanocuánticos”, Universidade de Santiago, 2003, xullo. (F2-G20)
- **USC, PROXECTO FIN DE CARREIRA**, Rosa María García López, “Estudio computacional de la electrociclación de 1,2,4,6-heptatetraeno y derivados heterosustituídos”, Universidade de Santiago, 2003, novembro. (F2-G20)
- **USC, PROXECTO FIN DE CARREIRA**, Santiago Marcos Varela Varela, “Estudio computacional de electrociclaciones de dienilcetenas a ciclohexadienonas”, Universidade de Santiago, 2003, xullo. (F2-G20)
- **USC, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN**, Faustino Gómez et al. , “Desarrollo de un monitor de haz para contro de calidad en radioterapia”, Xunta de Galicia PGIDT1INN20601PR, 2001-2004. (F2-G15)
- **USC, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN**, Faustino Gómez et al. , “Desarrollo de un detector de imagen portal para radioterapia”, MICYT DPI2002-00158, 2003-2006. (F2-G15)
- **USC, PROXECTO DE INVESTIGACIÓN**, Faustino Gómez et al. , “Study of electronics soft errors in Siemens Primus accelerators”, Siemens Oncology Care Systems (USA), 2003. (F2-G15)

Producción científica declarada por grupos de traballo da UVIGO:

- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Javier Vales-Alonso, Jesús Fernández, Francisco J. González-Castaño, Armando Caballero, “A parallel optimization approach for controlling allele diversity in conservation schemes”, Mathematical Biosciences, 2003, 183, 161-173. (F1-G8)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Jesús R. Flores, Karol Jankowski, Romuald Slupski, “Application of MP2 results in comparative studies of semiempirical ground-state energies of large atoms”, Collect. Czech. Chem. Commun, 2003, 68, 240-252. (F3-G36)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, J. R. Flores, “Electronic Spectra of SCnH Radicals (n=2-4): An ab Initio Study”, J. Phys. Chem. B, 2003, 107, 9711-9716. (F3-G36)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Francisco J. Gómez, Jesús R. Flores, “Theoretical Study of the SC3Hm+Systems, m={3,4}”, J. Phys. Chem. A. 2003, 107, 914-935. (F3-G36)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, F. Pérez-González, F. Balado, J. R. H. Martín, “Performance analysis of existing and new methods for data hiding with know-host information in additive channels”, Signal Processing, IEEE Transactions, 2003, vol. 51, nº4, 960-980. (F4-G40)

- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Antonio Vila, Ricardo A. Mosquera, “AIM study on the protonation of methyl oxiranes”, *Chemical Physics Letters*, 2003, 371, 540-547. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Antonio Vila, Ricardo Mosquera, “On the different origin of the stabilisation of oxygen versus sulphur H-bond complexes with water”, *Chemical Physics*, 2003, 291, 73-80. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Antonio Vila, José M. Pardo, Ricardo A. Mosquera, “Theoretical binding enthalpies and topological analysis of complexes of linear and cyclic ethers with Li⁺, Na⁺ and K⁺”, *Chemical Physics Letters*, 2003, 375, 499-505. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Patricia B. Quiñónez, Antonio Vila, Ana M. Graña, Ricardo A. Mosquera, “AIM study on the influence of fluorine atoms in the alkyl chain”, *Chemical Physics*, 2003, 287, 227-236. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Marcos Mandado, Ana M. Graña, Ricardo A. Mosquera, “On the structures of the methanol trimer and their cooperative effects”, *Chemical Physics Letters*, 2003, 381, 22-29. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, Marcos Mandado, Ana M. Graña, Ricardo A. Mosquera, Jerzy Cioslowski, “Transferability of energies of atoms in organic molecules”, *Chemical Physics Letters*, 2003, 371, 739-743. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO PUBLICADO**, María G. González Moa, Ricardo A. Mosquera, “Applicability of Resonance Forms in Pyrimidinic Bases. An AIM study”, *J. Phys. Chem. A*, 2003, 107, 5361-5367. (F4-G43)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Oreiro, Ulla, Pérez Hernández, Ostensen, Rodríguez López, MacDonald, “Balloon: a bright, high amplitude sdB pulsator”, *Astronomy & Astrophysics*, 2003. (F2-G17)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, Rosana Álvarez Rodríguez, Ángel Rodríguez de Lera, “The Woodward-Hoffmann-DePuy rule revisited”, *Organic Letters*, 2003. (F3-G30)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, Rosana Álvarez Rodríguez, Ángel Rodríguez de Lera, “Conrotatory ring opening reactions of cyclopropyl anions in monocyclic and tricyclic systems”, *Organica Letters*, 2003. (F3-G30)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Carlos Silva López, Olalla Nieto Faza, Brent A. Gregersen, Xabier López, Ángel Rodríguez de Lera, Darrin M. York, “Pseudorotation of natural and chemically modified biological phosphoranes: implications for RNA catalysis”, 2003. (F3-G30)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Carlos Silva López, Olalla Nieto Faza, Ángel Rodríguez de Lera, Darrin M. York, “Theoretical study of the vinyl allene oxide to cyclopent-2-en 1-one rearrangement: mechanism, torquoselectivity and solvent effects”, 2003. (F3-G30)
- **UVIGO, ARTIGO ENVIADO**, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, Rosana Álvarez Rodríguez, Ángel Rodríguez de Lera, “Theoretical study of the electrocyclic ring closure of hydroxypentadienyl cations: the Nazarov reaction and related cationic cyclizations”, 2003. (F3-G30)
- **UVIGO, ARTIGO**, Jesús R. Flores, Karol Jankowski, Romuald Slupski, K. Nowakowski, “Application of Accurate MP2 Energies for Closed-Shell Atoms in Examinations of Density Functionals for 3d10 electron ions”, 2003. (F3-G36)
- **UVIGO, CONGRESO**, Oreiro, Ulla, Pérez Hernández, MacDonald, Zapatero Osorio, García López, “Astrosismología en subenanas calientes tipo sdB”, XXIX Reunión Bienal de la Sociedad Española de Física, 2003, Madrid, xullo, publicado no libro de resúmenes. Editores: Luis Vázquez Martínez, Antonio Dobado González e Juan Pedro Sánchez Fernández. (F2-G17)
- **UVIGO, CONGRESO**, Oreiro, Ulla, Pérez Hernández, MacDonald, Zapatero Osorio, García López, “Studies of pulsations on sDBs: structural models and frequency calculations”, *Extended Horizontal Branch Stars and Related Objects*, University of Keele (UK), 2003, xuño. (F2-G17)
- **UVIGO, CONGRESO**, P. Comesana, F. Pérez-González, F. Balado, “Optimal strategies for spread-spectrum and quantized-projection image data hiding games with BER payoffs”, *Image Processing 2003*, 14-17 setembro, publicado en *Proceedings*, vol.2, 479-482. (F4-G40)

- **UVIGO, CONGRESO**, P. Comesana, F. Pérez-González, F. Balado, “Dither-modulation data hiding with distortion-compensation: exact performance analysis and an improved detector for JPEG attacks”, Image Processing 2003, 14-17 setembro, publicado em Proceedings, vol.2, 503-506. (F4-G40)
- **UVIGO, CONGRESO**, Félix Balado, Fernando Pérez-González, “Hexagonal quantizers are not optimal for 2-D data hiding”, SPIE, Santa Clara (USA), 2003, xaneiro, publicado em Security and Watermarking of Multimedia Contents V, vol.5020. (F4-G40)
- **UVIGO, CONGRESO**, Pedro Comesaña, Fernando Pérez-González, Félix Balado, “Optimal Data-Hiding Strategies for Games with BER Payoffs”, Second International Workshop on Digital Watermarking IWDW, Seul (Coreia), 2003, outubro. (F4-G40)
- **UVIGO, CONGRESO**, F. Balado, F. Pérez-González, P. Comesaña, “Blind iterative decoding of side-informed data hiding using the expectation maximization algorithm”, SPIE, San José (USA), 2004, xaneiro, publicado em Security, Steganography and Watermarking of Multimedia Contents VI, vol. 5306. (F4-G40)
- **UVIGO, CONGRESO**, P. Comesaña, F. Pérez-González, “Quantifying security leaks in spread spectrum data hiding: a game-theoretic approach”, SPIE, San José (USA), 2004, xaneiro, publicado em Security, Steganography and Watermarking of Multimedia Contents VI, vol. 5306. (F4-G40)
- **UVIGO, TESE DOUTORAL**, Félix Balado, “Digital image data hiding using side information”, Universidade de Vigo, 2003, decembro. (F4-G40)
- **PROXECTO DEA**, Raquel Oreiro Rey, “Estudio de pulsaciones de subenanas calientes”. 2003, outubro. (F2-G17)