



# **Currículum vitae**

## **Modelo normalizado**

Número de hojas que contiene: 22

Nombre: Carlos Vega de las Heras

Fecha: 17 de diciembre de 2007

El arriba firmante declara que son ciertos los datos que figuran en este currículum, asumiendo en caso contrario las responsabilidades que pudieran derivarse de las inexactitudes que consten en el mismo.

- Este currículum no excluye que durante el proceso de evaluación se le requiera para ampliar y justificar la información aquí contenida.

---

APELLIDOS: VEGA DE LAS HERAS

NOMBRE: CARLOS

SEXO: V

D.N.I. FECHA DE NACIMIENTO: 28-8-1964

N.º FUNCIONARIO: EC0526447457A0500

DIRECCIÓN PARTICULAR: C/AFUERAS A VALVERDE, 20, 3D

CIUDAD: MADRID

DISTRITO POSTAL: 28034

TELÉFONO: (91) 3720346

ESPECIALIZACIÓN (CÓDIGO UNESCO): 2210.

---

#### FORMACIÓN ACADÉMICA

<u>LICENCIATURA/INGENIERÍA</u>	<u>CENTRO</u>	<u>FECHA</u>
CIENCIAS QUÍMICAS	FAC.QUÍMICAS, UNIV.COMPLUTENSE	13/7/87
<u>DOCTORADO</u>		
CIENCIAS QUÍMICAS	FAC.QUÍMICAS, UNIV.COMPLUTENSE	21/3/91

DIRECTOR(ES) DE TESIS: SANTIAGO LAGO ARANDA

---

#### SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL

ORGANISMO: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

FACULTAD, ESCUELA o INSTITUTO: FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

DEPT./SECC./UNIDAD ESTR.: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA FÍSICA

CATEGORÍA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO: CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD, 2/4/2005

DIRECCIÓN POSTAL: CIUDAD UNIVERSITARIA, 28040 MADRID

TELÉFONO (indicar prefijo, número y extensión): (91) 3944202

FAX: (9X) 91 3944135

CORREO ELECTRÓNICO: cvega@quim.ucm.es

PLANTILLA  OTRAS SITUACIONES  ESPECIFICAR:  
CONTRATADO   
BECARIO  DEDICACIÓN: A TIEMPO COMPLETO:   
INTERINO  A TIEMPO PARCIAL:

---

#### ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARÁCTER CIENTÍFICO O PROFESIONAL

<u>FECHAS</u>	<u>PUESTO</u>	<u>INSTITUCIÓN</u>
1/1/88 – 17/10/90	BECARIO P.F.P.I	Universidad Complutense
18/10/90 – 30/9/91	PROF.AYUDANTE ESCUELA UNIVERSITARIA	Universidad Complutense
1/10/91 – 30/9/92	PROF.AYUDANTE DE FACULTAD	Universidad Complutense
1/10/92 – 28/4/95	PROF.TITULAR INTERINO	Universidad Complutense
28/4/95 – 2/4/05	PROF.TITULAR UNIVERSIDAD	Universidad Complutense

---

#### IDIOMAS DE INTERES CIENTÍFICO (R = regular, B = bien, C = correctamente)

<u>IDIOMA</u>	<u>HABLA</u>	<u>LEE</u>	<u>ESCRIBE</u>
Inglés	C	C	C
Francés	B	B	B

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN FINANCIADOS EN LOS ÚLTIMOS DIEZ AÑOS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB88-0143 PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DE FLUIDOS SIMPLES*

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT  
DURACIÓN DESDE: 1990 HASTA: 1992  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: SANTIAGO LAGO ARANDA

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB91-0364 INFLUENCIA DE LA FLEXIBILIDAD MOLECULAR Y LOS MOMENTOS MULTIPOLARES EN LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LÍQUIDOS*

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT  
DURACIÓN DESDE: 1993 HASTA: 1995  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: SANTIAGO LAGO ARANDA

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB94-0285 ESTUDIO TEÓRICO Y DE SIMULACIÓN DE LÍQUIDOS MOLECULARES COMPLEJOS CON POSIBLES APLICACIONES EN DIFERENTES CAMPOS CIENTÍFICOS E INDUSTRIALES*

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT  
DURACIÓN DESDE: 1996 HASTA: 1998  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS DEL 1-11-95 AL 1-3-97  
SANTIAGO LAGO ARANDA DEL 1-3-97 AL 1-11-98

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *CRG 970275 MOLECULAR MODELING OF SOLID-FLUID EQUILIBRIUM*

ENTIDAD FINANCIADORA: OTAN  
DURACIÓN DESDE: 1997 HASTA: 2000  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS AND PETER A. MONSON

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB97-0329 TEORIA Y SIMULACION DE TRANSICIONES DE FASE EN SISTEMAS COMPLEJOS: HIDROCARBUROS Y CRISTALES LIQUIDOS*

ENTIDAD FINANCIADORA: DGES  
DURACIÓN DESDE: Noviembre 1998 HASTA: Noviembre 2001  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 5 INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: THEORY AND COMPUTER SIMULATION OF LIQUID CRYSTALS

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea. HPMF-CT-1999-00163. Beca Post-Doctoral Marie Curie para recibir en nuestro grupo al Dr. Carl McBride (Reino Unido)  
DURACIÓN DESDE: Febrero 2000 HASTA: Febrero 2002  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *BFM2001-1420-C02-01 MECANICA ESTADISTICA DE SISTEMAS COMPLEJOS: MOLECULAS FLEXIBLES Y MESOFASES*

ENTIDAD FINANCIADORA: Direccion General de Investigacion  
DURACIÓN DESDE: Noviembre 2001 HASTA: Noviembre 2004  
NUMERO DE INVESTIGADORES: 5  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2004-06227-C02-02 MODELIZACIÓN MOLECULAR DEL EQUILIBRIO DE FASES DE SISTEMAS DE INTERÉS TECNOLÓGICO Y/O BIOLÓGICO*

ENTIDAD FINANCIADORA: Direccion General de Investigacion (DGI)  
DURACIÓN DESDE: Diciembre 2004 HASTA: Diciembre 2007  
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2007-66079-C02-01 SIMULACION POR ORDENADOR DEL EQUILIBRIO DE FASES DEL AGUA*

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Investigación (DGI)

DURACIÓN DESDE: Octubre 2007 HASTA: Diciembre 2010

NÚMERO DE INVESTIGADORES: 6

INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FP6-509249 : THEORY AND COMPUTER SIMULATION OF INTERFACIAL PHENOMENA.*

ENTIDAD FINANCIADORA: . Unión Europea. Marie Curie Host Fellowships for the transfer or knowledge MTKD-CT-2004-509249.

DURACIÓN DESDE: Marzo 2005 HASTA: Marzo 2008

NUMERO DE INVESTIGADORES: Grupos de investigación de 5 países de la Unión Europea: Reino Unido, Alemania, Austria, España, República Checa y Polonia.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: (Laboratorio de Madrid) CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *S-0505/ESP/0299. MODELADO Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS NO HOMOGÉNEOS EN MATERIA CONDENSADA: MOSSHONO.*

ENTIDAD FINANCIADORA: . Comunidad de Madrid. Actividades entre grupos de I+D de la Comunidad de Madrid

DURACIÓN DESDE: Enero 2006 HASTA: Enero 2010

NUMERO DE INVESTIGADORES: 23 investigadores de la Comunidad de Madrid. Cuatro investigadores de la Universidad Complutense de Madrid.

INVESTIGADOR PRINCIPAL (del grupo de la U.Complutense): CARLOS VEGA DE LAS HERAS

## PUBLICACIONES

---

Indicar volumen, páginas inicial y final (año).

---

1. AUTORES (p.o. de firma): S.Lago y C.Vega  
TÍTULO: *A generalization for mixtures of a fast algorithm to calculate some orientational averages*  
REVISTA: *Computers and Chemistry* **12**, 343–356, (1988).

---
2. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y D.Frenkel  
TÍTULO: *Monte Carlo study of rod like molecules. A test of perturbation theory for the Kihara model*  
REVISTA: *Molecular Physics* **67**, 633–650, (1989).

---
3. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, B.Saager y J.Fischer  
TÍTULO: *Molecular dynamics studies for the new refrigerant R152a with simple model potentials*  
REVISTA: *Molec.Phys.*, **68**, 1079–1093, (1989).

---
4. AUTORES (p.o. de firma): T.Boublik, C.Vega y M.D.Peña  
TÍTULO: *Equation of state of chain molecules*  
REVISTA: *J.Chem.Phys.* **93**, 730–736 (1990).

---
5. AUTORES (p.o. de firma): T.Boublik, C.Vega, S.Lago y M.D.Peña  
TÍTULO: *Quadrupolar hard gaussian*  
REVISTA: *Molec.Phys.* **71**, 1193–1203, (1990).

---
6. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago  
TÍTULO: *Molecular dynamics study of propane using two simple potential models*  
REVISTA: *J.Chem.Phys.* **93**, 8171–8179, (1990).

---
7. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago  
TÍTULO: *Structural study of the angle averaged soft Kihara potential for linear molecular models. A test of perturbation theory*  
REVISTA: *Molec.Phys.* **72**, 215–228, (1991).

---
8. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago  
TÍTULO: *Perturbation theory of angular Kihara fluids*  
REVISTA: *Journal of Chemical Physics* **94**, 310–320, (1991)

---
9. AUTORES (p.o. de firma): P.Sevilla, S.Lago, C.Vega y P.Padilla  
TÍTULO: *Solution of the Percus-Yevick equation for linear molecules interacting through either a Kihara or a soft repulsive potential*  
REVISTA: *Phys.Chem.Liq.* **23**, 1–14, (1991).

---
10. AUTORES (p.o. de firma): A.Lopez Rodriguez, C.Vega, J.Freire y S.Lago  
TÍTULO: *Potential parameters of methylene and methyl group from second virial coefficients of n-alkanes*  
REVISTA: *Molecular Physics* **73**, 691–701 (1991).

---
11. AUTORES (p.o. de firma): P.Padilla, S.Lago y C.Vega  
TÍTULO: *A bridge between Fischer and Boublik Thermodynamic perturbation theory : Calculating thermodynamic properties of pure substances*  
REVISTA: *Molecular Physics* **74**, 161–176, (1991).

---

12. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago  
TÍTULO: *Improved perturbation theory of Kihara fluids*  
REVISTA: Chem.Phys.Lett. **185**, 516–521, (1991).

---
13. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega  
TÍTULO: *Perturbation theory of hard quadupolar fluids*  
REVISTA: Molec.Phys. **75**, 427–442, (1992)

---
14. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y K.E.Gubbins  
TÍTULO: *Monte Carlo study of quadrupolar Kihara fluids*  
REVISTA: Molec.Phys. **75**, 881–895, (1992).

---
15. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, S.Lago y P.Padilla TÍTULO: *Thermodynamic properties of molecular fluids of any geometry from perturbation theory* REVISTA: J.Phys.Chem. **96**, 1900–1905, (1992). CLAVE: A

---
16. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, S.Lago, R.Pospisil, S.Labik and A.Malihevsky TÍTULO: *Thermodynamic properties of mixtures from perturbation theory* REVISTA: J.Phys.Chem. **96**, 1895–1899, (1992). CLAVE: A

---
17. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, E.P.A.Paras y P.A.Monson TÍTULO: *Solid-fluid equilibria for hard dumbbells via Monte Carlo simulation* REVISTA: J.Chem.Phys. **96**, 9060–9072, (1992). CLAVE: A

---
18. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, S.Lago, E.de Miguel y L.Rull TÍTULO: *Liquid-vapor equilibria of linear Kihara molecules.* REVISTA: J.Phys.Chem. **96**, 7431–7437, (1992) CLAVE: A

---
19. AUTORES (p.o. de firma): E.P.A.Paras, C.Vega y P.A.Monson TÍTULO: *Application of the cell theory to the thermodynamic properties of hard dumbbell solids* REVISTA: Molec.Phys. **77**, 803–821, (1992). CLAVE: A

---
20. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, E.P.A.Paras y P.A.Monson TÍTULO: *On the stability limit of the plastic crystal phase of hard dumbbell solids* REVISTA: J.Chem.Phys. **97**, 8543–8548, (1992). CLAVE: A

---
21. AUTORES (p.o. de firma): E.P.A.Paras, C.Vega y P.A.Monson TÍTULO: *A generalized Van der Waals theory of solid-fluid equilibria for nonspherical molecules.* REVISTA: Molec.Phys. **79**, 1063–1072, (1993). CLAVE: A

---
22. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, R.D.Kaminsky y P.A.Monson TÍTULO: *Adsorption of fluids in disordered porous media from integral equation theory* REVISTA: Journal of Chemical Physics **99**, 3003–3013 (1993). CLAVE: A

---
23. AUTORES (p.o. de firma): A.Lopez, C.Vega, J.Freire y S.Lago TÍTULO: *Improved results for the potential parameters of methyl and methylene obtained from second virial coefficients of n-alkanes* REVISTA: Molec.Phys. **80**, 1565–1567, (1993). CLAVE: A

---
24. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, S.Lago y B.Garzon TÍTULO: *Virial coefficients and equation of state of hard alkane models* REVISTA: J.Chem.Phys. **100**, 2182–2190, (1994). CLAVE: A

---
25. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago TÍTULO: *A fast algorithm to evaluate the shortest distance between rods* REVISTA: Computers and Chemistry **18**, 55–59, (1994). CLAVE: A

---
26. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y S.Lago TÍTULO: *Isotropic-nematic transition of hard polar and nonpolar molecules* REVISTA: J.Chem.Phys. **100**, 6727–6737, (1994). CLAVE: A

---

27. AUTORES (p.o. de firma):S.Lago, J.L.Lopez-Martin, B.Garzon y C.Vega TÍTULO: *Vapor-liquid equilibrium from a simple thermodynamic perturbation theory* REVISTA:J.Phys.Chem. **98**, 5355–5361 , (1994). CLAVE: A
- 
28. AUTORES (p.o. de firma):B.Garzon, S.Lago y C.Vega, E.de Miguel y L.F.Rull TÍTULO: *Computer simulation of vapor-liquid equilibria of linear quadrupolar fluids. Departures from the principle of corresponding states* REVISTA:J.Chem.Phys. **101**, 4166–4176, (1994). CLAVE: A
- 
29. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega,S.Lago y B.Garzon TÍTULO: *Linear Hard spheres models:Virial coefficients and equation of state* REVISTA:Molec.Phys. **82**, 1233–1247, (1994). CLAVE: A
- 
30. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, S.Lago y B.Garzon TÍTULO: *Liquid vapor equilibria of polar fluids from a van der Waals like theory.* REVISTA:J.Phys.Chem.**98**,11181-11192,(1994). CLAVE: A
- 
31. AUTORES (p.o. de firma): B.Garzon, S.Lago y C.Vega TÍTULO: *Reaction Field simulations of the vapor-liquid equilibria of dipolar fluids : Does the reaction field dielectric constant affect the coexistence properties ?* REVISTA:Chem.Phys.Lett. **231**,366–372, (1994). CLAVE: A
- 
32. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega y P.A.Monson TÍTULO: *Solid fluid equilibria for quadrupolar hard dumbbells via Monte Carlo simulation* REVISTA: J.Chem.Phys. **102**,1361–1372, (1995). CLAVE: A
- 
33. AUTORES (p.o. de firma):P.Padilla y C.Vega TÍTULO: *Packing effects on the conformational equilibrium of alkanes* REVISTA:Molec.Phys. **84**, 435–450, (1995). CLAVE: A
- 
34. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, L.F.Rull y S.Lago TÍTULO: *Determination of the Fisher Widom line for systems interacting through short ranged potentials* REVISTA:Phys.Rev.E. **51**, 3146–3155, (1995). CLAVE: A
- 
35. AUTORES (p.o. de firma):B.Garzon, S.Lago , C.Vega, y L.F.Rull TÍTULO: *Computer simulation of vapor-liquid equilibria of linear dipolar fluids. Departures from the principle of corresponding states* REVISTA:J.Chem.Phys. **102**, 7204–7215, (1995). CLAVE: A
- 
36. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, B.Garzon, L.G.McDowell y S.Lago TÍTULO: *The vapour-liquid equilibria of propane and n-alkane conformers* REVISTA:Molec.Phys. **85**, 679-699, (1995). CLAVE: A
- 
37. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega and P.A.Monson TÍTULO: *Solid-liquid equilibrium for quadrupolar molecules* REVISTA:Molec.Phys. **85**,413–421, (1995). CLAVE: A
- 
38. AUTORES (p.o. de firma):A.Gil Villegas, C.Vega, F.del Rio y A.Malijevsky TÍTULO: *Structure of variable-width square-well fluids from the Reference Hypernetted Chain equation* REVISTA: Molec.Phys. **86**,857–864, (1995). CLAVE: A
- 
39. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega ,L.G.MacDowell and P.Padilla TÍTULO: *Equation of state for hard n-alkane models: Long chains* REVISTA: Journal of Chemical Physics **104**, 701–713 (1996). CLAVE: A
- 
40. AUTORES (p.o. de firma):L.F.Rull, C.Vega and S.Lago TÍTULO: *Absence of criticality in the Reference Hypernetted Chain Equation* REVISTA:Molec.Phys. **87**, 1235–1242, (1996). CLAVE: A
- 
41. AUTORES (p.o. de firma):A.Gil Villegas, F.del Rio y C.Vega TÍTULO: *Thermodynamics of fluids from equivalence of collision properties* REVISTA: Phys.Rev.E **53**, 2326-2336, (1996). CLAVE: A
-

42. AUTORES (p.o. de firma):X.Cottin, E.P.A.Paras, C.Vega and P.A.Monson TÍTULO: *Fluid-solid Equilibrium : New perspectives from molecular theory* REVISTA: *Fluid Phase Equilibria* **117**, 114–125, (1996). CLAVE: A
- 
43. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega and L.G.MacDowell TÍTULO: *Understanding the critical properties of chain molecules* REVISTA: *Molec.Phys.* **88**,1575–1602, (1996). CLAVE: A
- 
44. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y A.Lopez Rodriguez TÍTULO: *Second virial coefficient, critical temperatures and shape of n-alkanes* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* **105**, 4223–4233 (1996). CLAVE: A
- 
45. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, F.Bresme and J.L.F.Abascal TÍTULO: *The fluid solid equilibrium of charged hard spheres* REVISTA: *Phys.Rev.E* **54**, 2746–2760, (1996). CLAVE: A
- 
46. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, B.Garzon, L.G.MacDowell, P.Padilla, S.Calero and S.Lago TÍTULO: *The vapour-liquid equilibrium of n-alkanes* REVISTA:*J.Phys.Condens.Matter* **8**, 9643–9648, (1996). CLAVE: A
- 
47. AUTORES (p.o. de firma): P.Padilla and C.Vega TÍTULO: *n-alkanes in random porous media: Can we regard the system as a binary equilibrium mixture ?* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* **106**, 1997–2011 (1997). CLAVE: A
- 
48. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega TÍTULO: *Virial coefficient and equation of state of hard ellipsoids* REVISTA:*Molec.Phys.* **92**, 651–665, (1997). CLAVE: A
- 
49. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega and P.A.Monson TÍTULO: *Plastic Crystal Phases of hard dumbbells and hard spherocylinders* REVISTA:*J.Chem.Phys.* **107**, 2696–2697,(1997). CLAVE: A
- 
50. AUTORES (p.o. de firma):S.Lago , B.Garzon, S.Calero and C.Vega TÍTULO: *Accurate simulations of the vapor-liquid equilibrium of important organic solvents and other diatomics* REVISTA:*J.Phys.Chem.* **101**, 6763–6771, (1997). CLAVE: A
- 
51. AUTORES (p.o. de firma): S.Calero,S.Lago,L.G.MacDowell, B.Garzon y C.Vega. TÍTULO: *Simulacion de propiedades dinamicas y de transporte para fluidos lineales de Kihara. Resultados preliminares.* REVISTA:*Informacion Tecnologica* **8**, 185–191, (1997). CLAVE: A
- 
52. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega TÍTULO: *The phase diagram of mixtures of hard spheres in the limit of infinite size ratio* REVISTA:*J.Chem.Phys.* **108**, 3074–3075, (1998). CLAVE: A
- 
53. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, B.Garzon,S.Lago and P.A.Monson TÍTULO: *Understanding the phase diagram of quadrupolar fluids* REVISTA:*J.Mol.Liq.* **76**, 157–169, (1998). CLAVE: A
- 
54. AUTORES (p.o. de firma):P.Padilla, O.Pizio, A.Trokhymchuk and C.Vega TÍTULO: *Adsorption of dimerizing and dimmer fluids in disordered porous media* REVISTA:*J.Phys.Chem.* **102**,3012–3017, (1998). CLAVE: A
- 
55. AUTORES (p.o. de firma):L.G.MacDowell,C.Vega and P.Padilla TÍTULO: *Second virial coefficients and equation of state of hard flexible molecules* REVISTA:*Anales de Fisica* **10**, 1–2, (1998). CLAVE: A
- 
56. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell and C.Vega TÍTULO: *The second virial coefficient of hard alkane models* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* **109**, 5670–5680, (1998). CLAVE: A
- 
57. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell and C.Vega TÍTULO: *Vapour-liquid equilibria of linear and branched alkanes from perturbation theory* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* **109**, 5681–5690, (1998). CLAVE: A
-



58. AUTORES (p.o. de firma):P.Padilla, C.Vega, O.Pizio and A.Trokhymchuk TÍTULO: *The structure and adsorption of diatomic fluids in disordered porous media: A MC study*. REVISTA: Molecular Physics **95** , 701–712, (1998). CLAVE: A
- 
59. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega and P.A.Monson TÍTULO: *Solid-Fluid equilibrium for a molecular model with short ranged directional forces* REVISTA:Journal of Chemical Physics **109**, 9938–9949 , (1998). CLAVE: A
- 
60. AUTORES (p.o. de firma):B.Garzon, S.Lago, C.Vega. TÍTULO: *Monte Carlo simulations of dipolar and quadrupolar linear Kihara fluids. A test of thermodynamic perturbation theory* REVISTA: Molecular Physics **96** , 123–132 , (1999). CLAVE: A
- 
61. AUTORES (p.o. de firma):A.Lopez Rodriguez, C.Vega and J.J.Freire TÍTULO: *Determination of potential parameters for alkanes* REVISTA: J.Chem.Phys. **111** , 438–439 , (1999). CLAVE: A
- 
62. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell, C.Vega and A.L.Rodriguez TÍTULO: *Critical properties of mixtures of alkanes from perturbation theory* REVISTA: J.Chem.Phys. **111** , 3183–3191 , (1999). CLAVE: A
- 
63. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega,L.G.MacDowell and A.L.Rodriguez. TÍTULO: *Excess properties of mixtures of n-alkanes from perturbation theory* REVISTA: J.Chem.Phys. **111** , 3192–3202 , (1999). CLAVE: A
- 
64. AUTORES (p.o. de firma):A.P.Malanoski,C.Vega and P.A.Monson TÍTULO: *An application of Cell Theory to Molecular Models of n-alkane solids* REVISTA: Molecular Physics **98** , 363–370, (2000). CLAVE: A
- 
65. AUTORES (p.o. de firma):L.G.MacDowell, M.Muller, C.Vega and K.Binder TÍTULO: *Equation of state and critical behavior of polymer models: A quantitative comparison between Wertheim's thermodynamic perturbation theory and computer simulations* REVISTA: J.Chem.Phys. **113** , 419–433 , (2000). CLAVE: A
- 
66. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega TÍTULO: *Evaluating virial coefficients for multicomponent mixtures: hard sphere mixtures and flexible chains* REVISTA: Molecular Physics **98**, 973–985 , (2000). CLAVE: A
- 
67. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega and L.G.MacDowell TÍTULO: *Critical temperature of infinitely long chains from Wertheim's perturbation theory* REVISTA: Molecular Physics **98** ,1295–1308 , (2000). CLAVE: A
- 
68. AUTORES (p.o. de firma):F.Bresme, C.Vega and J.L.F.Abascal TÍTULO: *Order-disorder transition in the solid phase of a charged hard sphere model* REVISTA: Phys.Rev.Lett. **85**, 3217–3220 , (2000). CLAVE: A
- 
69. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega, J.M.Labaig, L.G.MacDowell and E.Sanz TÍTULO: *The virial coefficients of the pearl-necklace model* REVISTA: J.Chem.Phys. **113** , 10398–10409 , (2000). CLAVE: A
- 
70. AUTORES (p.o. de firma): C.Menduina, C.McBride y C.Vega TÍTULO: *The second virial coefficient of quadrupolar two center Lennard-Jones models* REVISTA: Physical Chemistry and Chemical Physics **3** , 1289–1296 , (2001). CLAVE: A
- 
71. AUTORES (p.o. de firma):C.McBride, C.Vega y L.G.MacDowell TÍTULO: *Isotropic-nematic transition : a study of the influence of intra-molecular flexibility using a fused hard sphere model*. REVISTA: Physical Review E **64** , 011703-1–011703-14 , (2001). CLAVE: A
- 
72. AUTORES (p.o. de firma):C.Vega y L.G.MacDowell TÍTULO: *Extending Wertheim's theory to the solid phase: the freezing of the pearl-necklace model* REVISTA: J.Chem.Phys. **114** , 10411–10418 , (2001). CLAVE: A
-

73. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride y L.G.MacDowell TÍTULO: *Liquid crystal phase formation for the linear tangent hard sphere model from Monte Carlo simulations* REVISTA: J.Chem.Phys. **115**, 4203–4211, (2001). CLAVE: A
- 
74. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell, C.Vega y E.Sanz TÍTULO: *Equation of state of model branched alkanes: theoretical predictions and configurational bias Monte Carlo simulations* REVISTA: J.Chem.Phys. **115**, 6220–6235, (2001). CLAVE: A
- 
75. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride y C.Vega TÍTULO: *Fluid-solid equilibrium for two dimensional hard disk chains from Wertheim's perturbation theory* REVISTA: Journal of Chemical Physics **116**, 1757–1759 (2002). CLAVE: A
- 
76. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride and L.G.MacDowell TÍTULO: *The effect of flexibility on the phase diagram of simple molecular models* REVISTA: Physical Chemistry and Chemical Physics **4**, 853–862 (2002). CLAVE: A
- 
77. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, F.J.Blas y A.Galindo TÍTULO: *Extending Wertheim's perturbation theory to the solid phase of Lennard-Jones chains. Determination of the global phase diagram.* REVISTA: Journal of Chemical Physics **116**, 7645–7655, (2002). CLAVE: A
- 
78. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride TÍTULO: *Scaling laws for the equation of state of flexible and linear tangent hard sphere chains.* REVISTA: Physical Review E **65**, 052501–052504, (2002). CLAVE: A
- 
79. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride, C.Menduina TÍTULO: *The second virial coefficient of the dipolar two center Lennard-Jones model.* REVISTA: Physical Chemistry and Chemical Physics **4**, 3000–3007, (2002). CLAVE: A
- 
80. AUTORES (p.o. de firma): J.Largo, C.Vega, L.G.MacDowell and J.R.Solana TÍTULO: *A computer simulation study of racemic mixtures* REVISTA: Molecular Physics **100**, 2397–2415 (2002). CLAVE: A
- 
81. AUTORES (p.o. de firma): E.de Miguel and C.Vega TÍTULO: *The global phase diagram of the Gay Berne model* REVISTA: Journal of Chemical Physics, **117**, 6313–6322 (2002) CLAVE: A
- 
82. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride and C.Vega TÍTULO: *A Monte Carlo study of the influence of molecular flexibility on the phase diagram of a fused hard sphere model* REVISTA: Journal of Chemical Physics, **117**, 10370–10379, (2002). CLAVE: A
- 
83. AUTORES (p.o. de firma): F.J.Blas, A.Galindo y C.Vega TÍTULO: *Study of the solid-liquid-vapor phase equilibria of flexible chain molecules using Wertheim's thermodynamic perturbation theory* REVISTA: Molecular Physics, **101**, 449–458, 1016 (2003). CLAVE: A
- 
84. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride, E.de Miguel, F.J.Blas y A.Galindo TÍTULO: *The phase diagram of the two center Lennard-Jones model as obtained from computer simulation and from Wertheim's thermodynamic perturbation theory* REVISTA: Journal of Chemical Physics, **118**, 10696–10706, (2003). CLAVE: A
- 
85. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell, C.Menduina, C.Vega y E.de Miguel TÍTULO: *The third virial coefficient of diatomic quadrupolar molecules* REVISTA: Physical Chemistry and Chemical Physics, 2851–2857, (2003). CLAVE: A
-

86. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, J.L.F.Abascal, C.McBride, y F.Bresme TÍTULO: *The fluid-solid equilibrium for a charged hard sphere model revisited* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **119**, 964–971, (2003). CLAVE: A
- 
87. AUTORES (p.o. de firma): E.Sanz, C.McBride y C.Vega TÍTULO: *The properties of fully flexible Lennard-Jones chains in the solid phase: Wertheim's TPT1 theory and simulation.* REVISTA: Molecular Physics, **101**, 2241-2255, (2003). CLAVE: A
- 
88. AUTORES (p.o. de firma): J.Largo, M.J.Maeso, J.R.Solana, C.Vega y L.G.MacDowell TÍTULO: *Bonded hard-sphere theory and computer simulation of the equation of state of linear fused hard sphere fluids.* REVISTA: Journal of Chemical Physics, **119**, 9633–9639, (2003). CLAVE: A
- 
89. AUTORES (p.o. de firma): F.J.Blas, E.Sanz, C.Vega y A.Galindo TÍTULO: *Fluid-solid equilibria of flexible and linear rigid tangent chains from Wertheim's thermodynamic perturbation theory* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **119**, 10958–10971, (2003). CLAVE: A
- 
90. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell, C.Menduina, C.Vega y E.de Miguel TÍTULO: *Critical properties of molecular fluids from the virial series* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **119**, 11367–11373, (2003). CLAVE: A
- 
91. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal, C.Vega, C.McBride y F.Bresme , TÍTULO: *Characterization of the order-disorder transition of a charged hard sphere model* REVISTA: Physical Review E , **68**, 052501–052504, (2003), CLAVE: A
- 
92. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, L.G.MacDowell, C.McBride, E.Sanz, F.J.Blas y A.Galindo TÍTULO: *Molecular modeling of flexible molecules: vapor-liquid and fluid-solid equilibria.* REVISTA: Journal of Molecular Liquids , **113**, 37–51, ,(2004). CLAVE: A
- 
93. AUTORES (p.o. de firma): A.Galindo, C.Vega, E.Sanz, L.G.MacDowell, E.de Miguel y F.J.Blas TÍTULO: *Computer simulation study of the global phase behaviour of linear rigid Lennard-Jones chain molecules: Comparison with flexible model* REVISTA: J.Chem.Phys. , **120**, 3957–3968, (2004). CLAVE: A
- 
94. AUTORES (p.o. de firma): E.Sanz, C.Vega, J.L.F.Abascal and L.G.MacDowell TÍTULO: *The phase diagram of water from computer simulation* REVISTA: Physical Review Letters , , **92**, 2557011–2557014, (2004). CLAVE: A
- 
95. AUTORES (p.o. de firma): E.Sanz, C.Vega, J.L.F.Abascal and L.G.MacDowell TÍTULO: *Tracing the phase diagram of the TIP4P model of water* REVISTA: J. Chem. Phys. **121**, 1165-1166 (2004). CLAVE: A
- 
96. AUTORES (p.o. de firma): L.G.MacDowell, E.Sanz, C.Vega and J.L.F.Abascal TÍTULO: *Combinatorial entropy and phase diagram of partially ordered ice phases* REVISTA: J. Chem. Phys. **121**, 10145-10158 (2004). CLAVE: A
- 
97. AUTORES (p.o. de firma): Carl Mc Bride, Carlos Vega, Eduardo Sanz, Jose L. F. Abascal TÍTULO: *Formation of high density amorphous ice by decompression of ice VII and ice VIII at 135 K.* REVISTA: J. Chem. Phys. **121**, 11907–11911 (2004). CLAVE: A
- 
98. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride, C.Vega, E.Sanz, C.Vega, J.L.F.Abascal y L.G.MacDowell TÍTULO: *The range of meta stability of ice-water melting for two simple models of water* REVISTA: Molecular Physics , **103**, 1–5, (2005). CLAVE: A
-

99. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, E.Sanz y J.L.F.Abascal TÍTULO: *The melting point of the most popular models of water* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **122**,114507, (2005). CLAVE: A
- 
100. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, C.McBride, E.Sanz, J.L.F.Abascal TÍTULO: *Radial distribution functions and densities for SPC/E, TIP4P and TIP5P models for liquid water and ices Ih, Ic, II, III, IV, V, VI, VII, VIII, IX, XI and XII* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , **7**,1450–1456, (2005). CLAVE: A
- 
101. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal, E.Sanz, R.Garcia y C.Vega TÍTULO: *A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **122**,234511, (2005). CLAVE: A
- 
102. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride, C.Vega, y E.Sanz TÍTULO: *Non-Markovian melting: a novel procedure to generate initial liquid like phases for small molecules for use in computer simulation studies.* REVISTA: Computer Physics Communications , **170**, 137–143, (2005). CLAVE: A
- 
103. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y J.L.F.Abascal TÍTULO: *Relation between the melting temperature and the temperature of maximum density for the most common models of water* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **123**, 144504, (2005). CLAVE: A
- 
104. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega , J.L.F.Abascal, E.Sanz, L.G.MacDowell y C.McBride TÍTULO: *Can simple models describe the phase diagram of water ?* REVISTA: Journal of Physics Condensed Matter , **17**, S3283–S3288, (2005). CLAVE: A
- 
105. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **123**, 234505-1–234505-12, (2005). CLAVE: A
- 
106. AUTORES (p.o. de firma): R.G.Fernandez, J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *The melting point of ice  $I_h$  for common water models calculated from direct coexistence of the solid-liquid interface* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **124**, 144506-1–144506-11, (2006). CLAVE: A
- 
107. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, J.L.F.Abascal y I.Nezbeda TÍTULO: *Vapor liquid equilibria from the triple point up to the critical point for the new generation of TIP4P like models: TIP4P/Ew, TIP4P/2005 and TIP4P/Ice* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **125**, 034503-1–034503-9, (2006). CLAVE: A
- 
108. AUTORES (p.o. de firma): H.Docherty, A.Galindo, C.Vega y E.Sanz TÍTULO: *A potential model for methane in water describing correctly the solubility of the gas and the properties of the methane hydrate* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **125**, 074510-1–074510-9, (2006). CLAVE: A
- 
109. AUTORES (p.o. de firma): M.Martin-Conde, C.Vega y L.G.MacDowell TÍTULO: *Computer simulation of two new solid phases of water: ice XIII and ice XIV* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **125**, 116101-1–116101-2, (2006). CLAVE: A
- 
110. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F. Abascal, R.G. Fernandez, C.Vega y M.A.Carignano TÍTULO: *The melting temperature of the six site potential model of water* REVISTA: Journal of Chemical Physics , **125**, 166101-1,166101-2, (2006). CLAVE: A
- 
111. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega , M.Martin-Conde y A.Patrykiewicz TÍTULO: *Absence of superheating for ice  $I_h$  with a free surface: a new method of determining the melting point of different water models.* REVISTA: Molecular Physics , **104**, 3583–3592 (2006). CLAVE: A
-

112. AUTORES (p.o. de firma): E.Sanz y C.Vega TÍTULO: *Solubility of KF and NaCl in water by molecular simulation* REVISTA: J.Chem.Phys. , 126, 014507-1–014507-13, (2007). CLAVE: A
- 
113. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega y E.de Miguel TÍTULO: *The surface tension of the most popular models of water by using the extended Widom method* REVISTA: J.Chem.Phys. , 126, 154707-1–154707-10, (2007). CLAVE: A
- 
114. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *The melting point of hexagonal ice (I<sub>h</sub>) is strongly dependent on the quadrupole of the water models* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , 9, 2775-2778 , (2007). CLAVE: A
- 
115. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *Dipole-Quadrupole force ratios determine the ability of potentials models to describe the phase diagram of water* REVISTA: Physical Review Letters , 98, 237801-1-237801-4 , (2007). CLAVE: A
- 
116. AUTORES (p.o. de firma): H.Docherty, A.Galindo, C.Vega y E.Sanz TÍTULO: *An investigation of the salting out of methane from aqueous electrolyte solutions using computer simulations* REVISTA: J.Phys.Chem.B , 111, 8993-9000, (2007). CLAVE: A
- 
117. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya, C.Vega , J.P.K.Doye and A.A.Louis TÍTULO: *Phase diagram of model anisotropic particles with octahedral symmetry* REVISTA: J.Chem.Phys. , 127, 054501-1-054501-11, (2007). CLAVE: A
- 
118. AUTORES (p.o. de firma): J.L.Aragones, J.L.F.Abascal, E.G.Noya y C.Vega TÍTULO: *Properties of ices at 0 K: a test of water models* REVISTA: J.Chem.Phys. , 127, 154518-1-154518-10, (2007). CLAVE: A
- 
119. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega and E.G.Noya TÍTULO: *Revisiting the Frenkel-Ladd method to compute the free energy of solids: the Einstein molecule approach* REVISTA: J.Chem.Phys. , 127, 154113-1-154113-12 , (2007). CLAVE: A
- 
120. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya, C.Menduiña, J.L.Aragones y C.Vega TÍTULO: *Equation of state, thermal expansion coefficient and isothermal compressibility for ices I<sub>h</sub>, II, III, V and VI, as obtained from computer simulation* REVISTA: J.Phys.Chem.B , 111, 15877-15888 , (2007). CLAVE: A
- 
121. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *The water forcefield: importance of dipolar and quadrupolar interactions* REVISTA: J.Phys.Chem.C , 111, 15811-15822 , (2007). CLAVE: A
- 
122. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F. Abascal, R. García Fernández, L.G. MacDowell, E. Sanz and C. Vega TÍTULO: *Ice: a fruitful source of information about liquid water* REVISTA: J.Mol.Liq. , 136, 214-220 , (2007). CLAVE: A
- 
123. AUTORES (p.o. de firma): J.B.Caballero, E.G.Noya y C.Vega TÍTULO: *Complete phase behaviour of the symmetrical col-loidal electrolyte* REVISTA: J.Chem.Phys. , aceptado, (2007). CLAVE: A
-

**PARTICIPACIÓN EN CONTRATOS DE INVESTIGACIÓN DE ESPECIAL RELEVANCIA CON EMPRESAS Y/O ADMINISTRACIONES**

**(referido a los últimos diez años)**

---

TÍTULO DEL CONTRATO:

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA:

DURACIÓN DESDE:   HASTA:

INVESTIGADOR RESPONSABLE:

---

**PATENTES Y MODELOS DE UTILIDAD**  
(referido a los últimos diez años)

---

AUTORES (p.o. de firma):  
TÍTULO:

Nº DE SOLICITUD:                      PAÍS DE PRIORIDAD:                      FECHA DE PRIORIDAD:  
ENTIDAD TITULAR:  
PAÍSES A LOS QUE SE HA EXTENDIDO:  
EMPRESAS QUE LA ESTÁN EXPLOTANDO:

---

**ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS**  
(estancias continuadas superiores a seis meses en los últimos diez años)

CLAVE: D = doctorando, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

---

CENTRO: Facultad de Química Técnica			
LOCALIDAD: Bratislava	PAÍS: Checoslovaquia	AÑO: 1987	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Resonancia de espín electrónica de radicales			CLAVE: D
CENTRO: Instituto de Física Atómica y Molecular			
LOCALIDAD: Amsterdam	PAÍS: Holanda	AÑO: 1987	DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Simulación por Monte Carlo de Moléculas lineales			CLAVE: D
CENTRO: Instituto de Fluidos y Termodinámica. Universidad de Bochum.			
LOCALIDAD: Bochum	PAÍS: Alemania	AÑO: 1989	DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Dinámica molecular del refrigerante R152a mediante un ordenador vectorial			CLAVE: D
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Cornell			
LOCALIDAD: Ithaca	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1990	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Estudio mediante simulación de fluidos polares			CLAVE: D
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Massachusetts.			
LOCALIDAD: Amherst	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1991-1992	DURACIÓN: 16 meses
TEMA: Diagrama de fases de moléculas diatómicas: Teoría y simulación. Adsorción de fluidos en microporos: Teoría y simulación			CLAVE: P
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Massachusetts.			
LOCALIDAD: Amherst	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1997	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Equilibrio líquido-sólido de moléculas con enlaces de hidrógeno			CLAVE: O NATO COLLABORATIVE GRANT
CENTRO: Facultad de Química. Universidad Marie Curie Skolowska.			
LOCALIDAD: Lublin	PAÍS: Polonia	AÑO: 2006	DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Estudio mediante simulación de la interfase hielo-vapor			CLAVE: Proyecto Europeo MTKD-CT-2004-509249

---

## 12. CONGRESOS

- 
1. AUTORES: S.Lago, P.Padilla y C.Vega  
TÍTULO: Gas-gas equilibria from a thermodynamical perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada  
CONGRESO : Internacional. 9th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamic  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa, Portugal  
FECHA : Fecha: Julio 1986
- 
2. AUTORES: P.Padilla, C.Vega S.Lago y P.Sevilla  
TÍTULO: A bridge between Fischer and Boublik thermodynamic perturbation theories  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional . 6th International Conference on Mixtures of non electrolites and Intermolecular Interactions  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Merseburg, Alemania  
FECHA : Agosto 1988
- 
3. AUTORES: P.Sevilla, S.Lago ,P.Padilla y C.Vega  
TÍTULO: Numerical solution of the Percus-Yevick equation for hard and soft spherocylinders  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada  
CONGRESO : Internacional. 10th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga, Checoslovaquia  
FECHA : Agosto 1988
- 
4. AUTORES: C.Vega y D.Frenkel  
TÍTULO: Monte Carlo study of rod like Kihara molecules  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla  
CONGRESO : Internacional. NATO ASI  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bath, Reino Unido  
FECHA : Septiembre 1988
- 
5. AUTORES: P.Padilla, C.Vega, S.Lago, A.Alguacil, B.Garzón y P.Saiz  
TÍTULO: Bridge perturbation theory applied to hidrocarbons: results for linear carbon skeleton and some hints for non-linear  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. 4th International Conference on Thermodynamic of solution of non-electrolites  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela, España  
FECHA : Septiembre 1989
- 
6. AUTORES: C.Vega ,S.Lago y P.Padilla  
TÍTULO: Propane and butane conformers: preliminary results from a perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. 3th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga, Checoslovaquia  
FECHA : Mayo 1990
- 
7. AUTORES: S.Lago, C.Vega, P.Padilla y B.Garzón  
TÍTULO: Vapor-liquid equilibrium of molecular liquids with different geometries from perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. First Liquid Matter Conference of the European Physical Society  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lyon, Francia  
FECHA : Julio 1990
- 
8. AUTORES: S.Lago ,C.Vega , B.Garzón , P.Padilla y J.L.Lopez Martin  
TÍTULO: Conformational shift in liquid state and liquid-vapor equilibrium for n-butane from perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. Faraday Symposium 27 on the conformations of flexible molecules in fluid phases  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Southampton, Reino Unido



FECHA : Diciembre 1991

---

9. AUTORES: C.Vega, S.Lago, E.de Miguel y L.F.Rull  
TÍTULO: Liquid vapor equilibria of linear Kihara molecules  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. 18th Statphys  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Berlin, Alemania  
FECHA : Agosto 1992

---

10. AUTORES: C.Vega  
TÍTULO: **Recent progress in understanding liquids**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia plenaria Invitada**  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Club de profesores de la Universidad de Harvard, USA**  
FECHA : **Marzo 1992**

---

11. AUTORES: C.VEGA, E.P.A.PARAS Y P.A.MONSON  
TÍTULO: **SOLID-FLUID EQUILIBRIA IN SYSTEMS OF HARD DIATOMICS**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **COMUNICACIÓN ORAL (30 MINUTOS)**  
CONGRESO: *Internacional. American Institute of Chemical Engineering Annual Meeting*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **MIAMI, FLORIDA, USA**  
AÑO: **1992**

---

12. AUTORES: A.Gil Villegas, F.del Rio y C.Vega  
TÍTULO: Solution of the RHNC equation for the square well fluid  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Nacional. XXXV congreso de la Sociedad Mexicana de Física  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Puebla, México  
FECHA : Octubre 1992

---

13. AUTORES: J.L.L.Martin, B.Garzón, S.Lago, E.Lopez y C.Vega  
TÍTULO: Algunos resultados de interés en Ingeniería Química con bases relativamente rigurosas de Mecánica Estadística  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Nacional. Física Estadística 93  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: El Escorial, Madrid  
FECHA : Mayo 1993

---

14. AUTORES: B.Garzon, E.de Miguel, C.Vega, L.F.Rull y S.Lago  
TÍTULO: Vapor-liquid equilibria of dipolar linear Kihara fluids  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. Second liquid Matter Conference of the European Physical Society  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Florencia, Italia  
FECHA : Septiembre 1993

---

15. AUTORES: C.Vega  
TÍTULO: Vapor liquid equilibrium of dipolar linear Kihara fluids  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. IV Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Checoslovaquia  
FECHA : Junio 1994

---

16. AUTORES: B.Garzon, C.Vega, S.Lago y L.F.Rull  
TÍTULO: Simulación del equilibrio líquido vapor de fluidos lineales dipolares y cuadrupolares.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada  
CONGRESO : Internacional. Equilibrio de Fases (EQUIFASE).  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Caracas, Venezuela  
FECHA : Junio 1995

---

17. AUTORES: C.VEGA y P.A.MONSON  
TÍTULO: **EQUILIBRIO LÍQUIDO-SÓLIDO DE SISTEMAS MOLECULARES E IÓNICOS**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **COMUNICACIÓN ORAL (30 MINUTOS)**  
CONGRESO: *Nacional. FÍSICA ESTADÍSTICA 96*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **ZARAGOZA**  
AÑO: **1996**

---

**18. AUTORES: C.VEGA**  
TÍTULO: **THE FLUID-SOLID EQUILIBRIUM OF IONIC SYSTEMS**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **COMUNICACIÓN ORAL (30 MINUTOS)**  
CONGRESO: *Internacional. PRE-LIQUID MATTER CONFERENCE*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Universidad de Sheffield (REINO UNIDO)**  
AÑO: **1996**

---

**19. AUTORES: C.VEGA,B.GARZON,L.G.MACDOWELL,S.LAGO Y S.CALERO**  
TÍTULO: **THE VAPOUR-LIQUID EQUILIBRIUM OF N-ALKANES**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **COMUNICACIÓN ORAL (30 MINUTOS)**  
CONGRESO: *Internacional. THIRD EUROPEAN LIQUID MATTER CONFERENCE*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **NORWICH (REINO UNIDO)**  
AÑO: **1996**

---

**20. AUTORES: P.Padilla y C.Vega**  
TÍTULO: A computer simulation study of the similarities between a system of fluid alkanes and a mixture of alkanes and spherical particles  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada  
CONGRESO :*Internacional. 10th Nordic Symposium on Computer Simulation*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:*Tallin, Estonia*  
FECHA : Julio 1996

---

**21. AUTORES: C.VEGA,B.GARZON,S.LAGO AND P.MONSON**  
TÍTULO: **UNDERSTANDING THE PHASE DIAGRAM OF QUADRUPOLEAR FLUIDS**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **CONFERENCIA INVITADA (1 HORA)**  
CONGRESO: *Internacional. XXVI STATISTICAL MECHANICS MEETING*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **CUERNAVACA ,MEXICO.**  
AÑO: **1997**

---

**22. AUTORES: C.Vega, L.G.MacDowell y P.Padilla**  
TÍTULO: Coeficientes del virial y ecuación de estado de moléculas duras flexibles  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : *Nacional. Física Estadística 97*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: *Getafe, España*  
FECHA : Septiembre 1997

---

**23. AUTORES:L.G.MacDowell, C.Vega**  
TÍTULO: Vapor-Liquid equilibrium of linear and branched alkanes from a mean field perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : *Nacional. Primera reunión nacional sobre Estado Líquido*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: *Aguadulce, Almería*  
FECHA : Julio 1998

---

**24. AUTORES: L.G.MacDowell y C.Vega**  
TÍTULO: Vapor-Liquid equilibrium of linear and branched alkanes  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : *Internacional. European Molecular Liquids Conference*  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: *Mureau, Austria*  
FECHA : Noviembre 1998

---

**25. AUTORES: L.G.MacDowell, A.L.Rodríguez and C.Vega**  
TÍTULO: Phase coexistence and critical behavior of linear and branched alkanes mixtures from perturbation theory  
TIPO DE PARTICIPACIÓN:Poster  
CONGRESO : *Internacional. Thermodynamics 99*

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres, Reino Unido  
FECHA : Marzo 1999

---

26. AUTORES: C.Vega, J.M.Labaig, L.G.MacDowell  
TÍTULO: Second, Third and fourth virial coefficients of polymers: a Monte Carlo study  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. IV Liquid Matter Conference of the European Physical Society LUGAR DE CELEBRACIÓN:Granada, España  
FECHA : Julio 1999

---

27. AUTORES: C.Vega y P.A.Monson  
TÍTULO: Fluid-Solid equilibrium of molecular systems via computer simulation  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. European Research Conference: Solid-Fluid Interfaces 1999  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Castelvechio Pascoli, Italia  
FECHA : Septiembre 1999

---

28. AUTORES:C.Vega  
TÍTULO: Aplicaciones de la Mecánica Estadística al estudio de hidrocarburos  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada  
CONGRESO : Primer ciclo de conferencias de Física Básica y Aplicada de la Universidad de Huelva  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Huelva, España  
FECHA : Mayo 2000

---

29. AUTORES:C.McBride, L.G.MacDowell y C.Vega  
TÍTULO: The liquid crystal phase: a study of flexibility using a hard model  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO :Nacional. Fises 2000  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela, España  
FECHA : Septiembre 2000

---

30. AUTORES: C.Menduiña, C.McBride y C.Vega  
TÍTULO: Second virial coefficient calculations of quadrupolar linear molecules and their mixtures  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster  
CONGRESO : Internacional. 16th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Halifax, Canada  
FECHA : Agosto 2000

---

31. AUTORES: L.G.MacDowell, M.Muller, P.Virnau, C.Vega y K.Binder  
TÍTULO: Critical behavior of chain molecules and their mixtures and prediction of the critical point of polyethylene  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral  
CONGRESO : Internacional. Thermodynamics 2001  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Bristol, Reino Unido.  
FECHA : Abril 2001.

---

32. AUTORES: C.Vega  
TÍTULO: **The effect of flexibility on the phase diagram of simple molecular models.**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada (1 hora)**  
CONGRESO : **Seminarios del Dep. Química de la U.Durham.**  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Universidad of Durham, Reino Unido.**  
FECHA : **Mayo 2001.**

---

33. AUTORES:C.Vega  
TÍTULO: **Simple models, complex fluids**  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia plenaria invitada (1 hora)**  
CONGRESO : **Internacional. Global Phase Diagrams, International Bunsen Conference**  
LUGAR DE CELEBRACIÓN:**Colonia, Alemania**  
FECHA : **Agosto 2001**

---

34. AUTORES: C.Vega

TÍTULO: **Computer simulations of complex fluids**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla invitada**

CONGRESO : **Internacional. 17th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Rostock, Alemania**

FECHA : **Agosto 2002**

---

35. AUTORES: C.Vega

TÍTULO: **The phase diagram of the restricted primitive model**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla invitada**

CONGRESO : **Internacional. Thermodynamics 2003 (Royal Society of Chemistry)**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Cambridge, United Kingdom.**

FECHA : **Abril, 2003.**

---

36. AUTORES: C.Vega, F.J.Blas and A.Galindo

TÍTULO: **Extension of the Thermodynamic Perturbation Theory of Wetheim to Model Solid Phases of Attractive Chain Molecules**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla**

CONGRESO : **Internacional. 15th SYMPOSIUM ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Boulder, Colorado, USA.**

FECHA : **Junio , 2003.**

---

37. AUTORES: L.G.MacDowell, C.McBride, C.Menduiña, E.Sanz y C.Vega

TÍTULO: **Simulación por ordenador de fluidos moleculares**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla**

CONGRESO : **Nacional. Primera reunión de expertos en fluidos comprimidos**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Madrid, Campo de las Naciones.**

FECHA : **12-14 Noviembre 2003.**

---

38. AUTORES: L.G.MacDowell, C.Vega, P.Virmau, M.Muller and K.Binder

TÍTULO: **Polymer-solvent mixtures: a quantitative comparison between TIPT1 and computer simulation**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Poster**

CONGRESO : **Internacional. SAFT Simposium.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Barcelona.**

FECHA : **12 Diciembre 2003.**

---

39. AUTORES: **J.L.F.Abascal, E.Sanz, L.G.MacDowell and C.Vega**

TÍTULO: **Computer simulation of the phase diagram of water**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla invitada**

CONGRESO : **Internacional. Statphys 22.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Bangalore, India.**

FECHA : **5-9 Julio 2004**

---

40. AUTORES: E.Sanz, C.Vega, J.L.F.Abascal, L.G.MacDowell and C.McBride

TÍTULO: **Phase diagram, combinatorial entropy and metastability in water.**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Poster.**

CONGRESO : **Internacional. Conference on Disorder, complexity and Biology (DISCOMBO4).**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Varanasi, India.**

FECHA : **12-15 Julio 2004**

---

41. AUTORES: E.Sanz, C.Vega, J.L.F.Abascal and L.G.MacDowell

TÍTULO: **The phase diagram of water from computer simulation**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Poster**

CONGRESO : **Internacional. SIMU, bridging the scales.**

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Genova, Italia.**

FECHA : **29-31 Agosto 2004.**

---

42. AUTORES: F. J. Blas, A. Galindo, C. Vega, E. Sanz, and E. de Miguel

TÍTULO: Global phase behaviour of chain molecules: flexible and rigid models

TIPO DE PARTICIPACIÓN: poster

CONGRESO : 10th International Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design, Snow-bird

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Utah, USA

FECHA : 16-21 May 2004

---

**43. AUTORES: J.L.F.Abascal, E.Sanz, C.Vega, C.McBride and L.G.MacDowell**

**TÍTULO: What we have learn after three years of simulations of water and ices**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla**

**CONGRESO : Thermodynamics 2005 (organizado por la Royal Society of Chemistry)**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sesimbra, Portugal**

---

**44. AUTORES: C.Vega, E.Sanz, C.McBride, J.L.F.Abascal and L.G.MacDowell**

**TÍTULO: Determination of the phase diagram of water from computer simulation**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla**

**CONGRESO : 6th Liquid Matter Conference (organizado por la European Physical Society) , Julio 2005**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Utrecht, Holanda**

---

**45. AUTORES: C.Vega**

**TÍTULO: The phase diagram of water by computer simulation**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla**

**CONGRESO : 7th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Junio 2006**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lednice, Republica Checa**

---

**46. AUTORES: C.Vega,E.Sanz,J.L.F.Abascal,L.G.MacDowell, C.McBride, R.Garcia and M.M.Conde**

**TÍTULO: The phase diagram of water from computer simulation**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla**

**CONGRESO : Cecam workshop. Patchy colloids, Proteins and Network forming liquids: Analogies and new insights from computer simulations , Junio 2006.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lyon, Francia**

---

**47. AUTORES: H.Docherty, A.Galindo, M.M.Conde, E.Sanz y C.Vega**

**TÍTULO: A comparison of the statistical associating fluid theory for potentials of variable range to Monte Carlo simulations for electrolyte solutions**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster**

**CONGRESO : FOMMS (Foundations of Molecular Modeling and Simulation), Julio 2006**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Washington, Estados Unidos.**

---

**48. AUTORES: J.L.F. Abascal, R. García Fernández, L.G. MacDowell, E. Sanz, C. Vega**

**TÍTULO: Ice: A fruitful source of information about liquid water**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla**

**CONGRESO : EMLG/JMLG Annual Meeting, Liquids systems under extreme conditions , Septiembre 2006**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona**

---

**49. AUTORES: C.Vega,E.Sanz,J.L.F.Abascal,L.G.MacDowell, C.McBride, R.Garcia and M.M.Conde**

**TÍTULO: Computer simulation studies of the phase diagram of water**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla plenaria invitada.**

**CONGRESO : CCP5 Annual meeting, Septiembre del 2006.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bradford, Reino Unido**

---

**TESIS DOCTORALES DIRIGIDAS**  
(referidas a los últimos diez años)

---

**TÍTULO: TERMODINAMICA ESTADISTICA DE MOLECULAS FLEXIBLES: TEORIA Y SIMULACION**

**DOCTORANDO: LUIS GONZÁLEZ MACDOWELL**

**UNIVERSIDAD: Universidad Complutense**

**FACULTAD/ESCUELA: Ciencias Químicas**

**AÑO: 26 de Mayo del 2000**

**CALIFICACIÓN: Apto cum laude por unanimidad**

---

**TÍTULO: EQUILIBRIO TERMODINÁMICO DE SÓLIDOS MEDIANTE SIMULACIÓN MOLECULAR**

**DOCTORANDO: EDUARDO SANTIAGO SANZ GARCIA (Becario FPU)**

**UNIVERSIDAD: Universidad Complutense**

**FACULTAD/ESCUELA: Ciencias Químicas**

**AÑO: 13 de Enero del 2006**

**CALIFICACIÓN: Apto cum laude por unanimidad**

---

Participación en comités y representaciones internacionales

---

Tipo de participación: **Miembro del Consejo Editorial**

Entidad : **Revista Molecular Physics**

Fecha : **Enero 2007 a Enero 2010**

---

Tipo de participación: **Representante nacional**

Entidad : **Proyecto europeo COST P-13, "Forging the missing link: from molecular simulations to nanoscale experiments (MOLSIMU)".**

Fecha : **Junio 2004 a Junio 2008**

---

Titulo : **FISES 2005**

Tipo de actividad : **Organización de congreso**

Ambito : **Congreso Nacional de Física Estadística**

Lugar y fecha de celebracion : **Madrid , Junio 2005**

Tipo de responsabilidad : **Miembro del comité organizador**



OTROS MÉRITOS Y ACLARACIONES QUE SE DESEE HACER CONSTAR  
(utilice únicamente el espacio de esta página)

---

ANÁLISIS DE LAS PUBLICACIONES.

Desglose por revistas. Entre paréntesis el parámetro de impacto

Revista (impacto)	Número
Physical Review Letters(6)	3
Journal of Chemical Physics (3.3)	56
Journal of Physical Chemistry (4)	9
Physical Review E (2.1)	6
Chemical Physics Letters (2.3)	2
Molecular Physics (1.85)	29
Computer Physics Communications (1.51)	1
Physical Chemistry and Chemical Physics (1.5)	6
J.Phys.Condens.Matter(1.4)	2
Fluid Phase Equilibria(0.8)	1
Journal of Molecular Liquids (1.0)	3
Computers and Chemistry (0.8)	2
Physical Chemistry of Liquids (0.5)	1
Información Tecnológica	1
Anales de Física(0.3)	1
<b>TOTAL TRABAJOS PUBLICADOS:</b>	<b>123</b>

Análisis de las citas. Actualizado Diciembre 2007.

Número total de citas : 1940

**Factor H (h-index) = 24**

Posición mundial en el ranking de citaciones en el área de Química (Diciembre 2007) Periodo analizado (1997-2007). Datos tomados del Web of Knowledge, del Science Citation Index en Diciembre del 2007. Posición en el ranking en Diciembre del 2007:

6615 en cuanto a número total de citas

4221 en cuanto al cociente número de citas/número de artículos

- Premio Extraordinario de Licenciatura de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid . Media del expediente : 3.91
- Primer Premio Nacional de Licenciatura en Ciencias Químicas (B.O.E del 14 Julio de 1988)
- Premio Extraordinario de Doctorado de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid .
- Tres tramos investigadores (sexenios) concedidos. Tres tramos docentes (quinquenios) concedidos.
- Desde Enero del 2007 formo parte del Editorial Board de la Revista "Molecular Physics "publicada por Taylor and Francis en el Reino Unido.
- He sido nombrado (Junio 2004) representante nacional de España en el proyecto europeo COST P-13, "Forging the missing link: from molecular simulations to nanoscale experiments (MOLSIMU)".

- Actúo como referee habitual (7-8 publicaciones/año) en las revistas **Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry, Molecular Physics, J.Phys.Condens.Matter, Ind.Engineering Chemistry Research, Physical Review E, Phys.Rev.Lett. , Fluid Phase Equilibria.**
- **Beca Fulbright para estancias post-doctorales de doctores españoles en Estados Unidos. Disfrute : 1-9-91 al 31-12-92 . (Bajo la supervisión del profesor Peter A. Monson).**