



Currículum vitae

Modelo normalizado

Número de hojas que contiene: 22

Nombre: Carlos Vega de las Heras

Fecha: 21 de mayo de 2010

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
D.N.I. FECHA DE NACIMIENTO: 28-8-1964 N.º FUNCIONARIO: EC0526447457A0500
DIRECCIÓN PARTICULAR:
CIUDAD: MADRID DISTRITO POSTAL: TELÉFONO:
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: *FIS2010-XXXXXXX SIMULACIONES CLASICAS Y CUANTICAS DEL AGUA Y DE SU EQUILIBRIO DE FASES*

ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Investigación (DGI)

DURACIÓN DESDE: Solicitado, Febrero, 2010 HASTA:

NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5

INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

TÍTULO DEL PROYECTO: *BSCH-UCM (GR58/08 910570-797). Simulación por ordenador y modelado mecanoes-tadístico de líquidos y sólidos*

ENTIDAD FINANCIADORA: . UCM

DURACIÓN DESDE: Enero 2009 HASTA: Diciembre 2010

INVESTIGADOR PRINCIPAL (del grupo de la U.Complutense): JOSE LUIS FERNANDEZ ABASCAL

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

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

TÍTULO DEL PROYECTO: *P2009/ESP-1691. MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS. MOD-ELICO*

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

DURACIÓN DESDE: Enero 2010 HASTA: Enero 2014

NUMERO DE INVESTIGADORES: 50 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):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
-
52. 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
-
53. 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
-
54. 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
-
55. 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
-
56. 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
-
57. 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
-

58. 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
-
59. 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
-
60. 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
-
61. 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
-
62. 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
-
63. 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
-
64. 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
-
65. 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
-
66. 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
-
67. 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
-
68. 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
-
69. 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
-
70. 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
-
71. 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
-
72. 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
-

73. 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
-
74. 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
-
75. 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
-
76. 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
-
77. 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
-
78. 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
-
79. 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
-
80. 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
-
81. 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
-
82. 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 from Wertheim's thermodynamic perturbation theory* REVISTA: Journal of Chemical Physics ,**118**, 10696–10706, (2003). CLAVE: A
-
83. 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
-
84. 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
-
85. 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
-

86. 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
-
87. 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
-
88. 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
-
89. 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
-
90. 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
-
91. 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
-
92. 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
-
93. 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
-
94. 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
-
95. 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
-
96. 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
-
97. 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
-
98. 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
-

99. 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
-
100. 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
-
101. 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
-
102. 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
-
103. 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
-
104. 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
-
105. 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
-
106. 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
-
107. 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
-
108. 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
-
109. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega and P. A. Monson TÍTULO: *Solid-fluid equilibrium for a molecular model with short ranged directional forces (erratum)* REVISTA: Journal of Chemical Physics , 125, 109901-1,109901-2, (2006). CLAVE: A
-
110. 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
-
111. 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
-

112. 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
-
113. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal y C.Vega TÍTULO: *The melting point of hexagonal ice (I_h) is strongly dependent on the quadrupole of the water models* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , 9, 2775-2778 , (2007). CLAVE: A
-
114. 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
-
115. 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
-
116. 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
-
117. 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
-
118. 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
-
119. 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_h, II, III, V and VI, as obtained from computer simulation* REVISTA: J.Phys.Chem.B , 111, 15877-15888 , (2007). CLAVE: A
-
120. 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
-
121. 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
-
122. 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. 127, 244910 , (2007). CLAVE: A
-
123. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, E.Sanz, J.L.F.Abascal and E.G.Noya TÍTULO: *Determination of phase diagrams via computer simulation: methodology and applications to water, electrolytes and proteins* REVISTA: J.Phys.Condens.Matter 20, 153101, (2008). CLAVE: A
-
124. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya , C.Vega y E.de Miguel TÍTULO: *Determination of the melting point of hard spheres from direct coexistence simulation methods* REVISTA: J.Chem.Phys. 128, 154507, (2008). CLAVE: A
-
125. AUTORES (p.o. de firma): M.M.Conde, C.Vega y A.Patrykiewicz TÍTULO: *The thickness of a liquid layer on the free surface of ice as obtained from computer simulation.* REVISTA: J.Chem.Phys. 129,014702, (2008). CLAVE: A
-

126. AUTORES (p.o. de firma): F. Gamez, S. Lago, B.Garzon, P.Merkling and C.Vega TÍTULO: *Vapor-liquid equilibrium of fluids composed by oblate molecules*. REVISTA: *Molecular Physics* , 106, 1331-1339, (2008). CLAVE: A
-
127. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya, M.M.Conde and C.Vega TÍTULO: *Computing the free energy of molecular solids by the Einstein molecule approach: Ices XIII and XIV and a simple model of proteins*. REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 129, 104704-1, 104704-16, (2008). CLAVE: A
-
128. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega, J.L.F.Abascal, M.M.Conde and J.L.Aragones TÍTULO: *What ice can teach us about water interactions : a critical comparison of the performance of different water models* REVISTA: *Faraday Discussions* , 141, 251-276, (2009). CLAVE: A
-
129. AUTORES (p.o. de firma): J.L.Aragones, M.M. Conde , E.G.Noya and C.Vega TÍTULO: *The phase diagram of water at high pressures as obtained by computer simulations of the TIP4P/2005 model: the appearance of a plastic crystal phase* REVISTA: *Phys.Chem.Chem.Phys.* , 11, 543-555, (2009). CLAVE: A
-
130. AUTORES (p.o. de firma): J.L.F.Abascal, E.Sanz and C.Vega TÍTULO: *Triple points and coexistence properties of the dense phases of water calculated using computer simulation* REVISTA: *Phys.Chem.Chem.Phys.* , 11, 556-562 , (2009). CLAVE: A
-
131. AUTORES (p.o. de firma): H.L.Pi, J.L.Aragones, C.Vega, E.G.Noya, J.L.Abascal , M.A.Gonzalez and C.McBride TÍTULO: *Anomalies in water as obtained from computer simulations of the TIP4P/2005 model: density maxima, and density, isothermal compressibility and heat capacity minima* REVISTA: *Molec. Phys.* , 107, 365, (2009). CLAVE: A
-
132. AUTORES (p.o. de firma): J.L.Aragones y C.Vega TÍTULO: *Plastic crystal phases of simple water models* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 130, 244504, (2009). CLAVE: A
-
133. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride,C.Vega,E.G.Noya,R.Ramirez and L.M.Sese TÍTULO: *Quantum contribution in the ice phases: the path to a newempirical model for water: TIP4PQ/2005* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 131, 024506 , (2009). CLAVE: A
-
134. AUTORES (p.o. de firma): M.M.Conde, C. Vega, G.A.Tribello and B.Slater TÍTULO: *The phase diagram of water at negative pressures: Virtual ices* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 131, 034510 , (2009). CLAVE: A
-
135. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya ,C.Vega, L.M.Sese y R.Ramirez TÍTULO: *Quantum effects on the maximum in density of water as described by the TIP4PQ/2005 model* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 131, 124518 (2009) . CLAVE: A
-
136. AUTORES (p.o. de firma): C.Vega , M. M. Conde , C. McBride , J.L.F. Abascal , E.G. Noya , R.Ramirez y L.M.Sese TÍTULO: *Heat capacity of water: a signature of nuclear quantum effects* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 132, 046101 (2010) . CLAVE: A
-
137. AUTORES (p.o. de firma): B. Gonzalez , E.G.Noya , C. Vega y L. M. Sese TÍTULO: *Nuclear Quantum Effects in Water Clusters: The Role of the Molecular Flexibility* REVISTA: *J.Phys.Chem. B* , 114, 2484-2492 (2010). CLAVE: A
-
138. AUTORES (p.o. de firma): D.G.Salgado y C. Vega TÍTULO: *Melting point and phase diagram of methanol as obtained from computer simulations of the OPLS model* REVISTA: *J.Chem.Phys.* , 132 , 094505 , (2010). CLAVE: A
-

139. AUTORES (p.o. de firma): M. M. Conde, C.Vega, C. McBride, E.G.Noya, R.Ramirez y L. M. Sese TÍTULO: *Can gas hydrate structures be described using classical simulations?* REVISTA: J.Chem.Phys. , 132, 114503 , (2010). CLAVE: A
-
140. AUTORES (p.o. de firma): L. G. MacDowell y C. Vega TÍTULO: *Dielectric Constant of Ice Ih and Ice V: A Computer Simulation Study* REVISTA: J. Phys. Chem. B, , 114, 6089, (2010). 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 electrolytes 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 hydrocarbons: 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-electrolytes
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**

Autores: J.L.F. Abascal, C. Vega y F. Bresme

Clave: P

Título: Phase diagram of the RPM model: evidence of an order-disorder transition in the solid phases

Tipo de participación: Poster

Congreso: IUPAP 21st International Conference on Statistical Physics

Lugar de celebración: Cancún (Méjico)

Año: 2001

Mes: Julio

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

50. AUTORES: Amparo Galindo , Hugh Docherty, Eduardo Sanz, Carlos Vega y Maria M. Conde

TÍTULO: NEW POTENTIAL MODELS AND THEORETICAL APPROACHES FOR AQUEOUS SYSTEMS WITH SALTS AND METHANE: HYDRATE FORMATION AND SALTING OUT

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster.

CONGRESO : PPEd (Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design, Mayo 2007.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Creta, Grecia.

51. Autores: C. Vega

Título: Water at interfaces interactions

Tipo de participación: Charla Invitada (

Congreso: Workshop on Theory and Computer Simulation of Inhomogeneous Fluids

Lugar de celebración: Madrid

Mes: Mayo Año: 2007

52. AUTORES: Carlos Vega, J.L.F.Abascal,E.Sanz,L.G.MacDowell,E.G.Noya,M.M.Conde and J.L.Aragones

TÍTULO: Analysing the performance of water models to describe the phase diagram of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : Cecam workshop Modelling the structures and reactivity of silica and water: from molecule to macroscale, Septiembre del 2007.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lyon, Francia.

53. AUTORES: E.G.Noya, C.Vega, J.P.K.Doye, A.A.Louis

TÍTULO: Phase diagram of an octahedral anisotropic patchy model potential

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : Thermodynamics , Septiembre 2007.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Paris, Francia.

54. AUTORES: H. Docherty , A. Galindo , E. Sanz, C. Vega, M. M. Conde

TÍTULO: Hydrate formation and salting out: new potential models for methane in water and aqueous solutions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : Thermodynamics , Septiembre 2007.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Paris, Francia.

55. AUTORES: Poster 1. E.G.Noya, C.Vega, J.P.K.Doye, A.A.Louis Poster 2. C. Vega, E. Sanz, J. L. F. Abascal, L. G. MacDowell, E. G. Noya, M. M. Conde, J. L. Aragonés Poster 3. J.L. Aragonés, E.G. Noya, J.L.F. Abascal, C. Vega Poster 4. M.M. Conde , C. Vega , A. Patrykiewicz

**TÍTULO: Poster 1. Determination of the phase diagram of a simple model of proteins via computer simulation
Poster 2. Determination of the phase diagram via computer simulation: methodology and application to water
Poster 3. Properties of ices at 0K A test of water models
Poster 4. Absence of superheating for ice Ih with a free surface a new method of determining the melting point of different water models**

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Posters.

CONGRESO : Simbioma, Abril , 2008.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Konstanz, Alemania.

56. AUTORES: Gary N. I. CLARK, Amparo GALINDO, George JACKSON, Carlos VEGA

TÍTULO: The use of spectroscopic data for the degree of association to determine optimal models for water in theoretical and computer simulation methods.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster.

CONGRESO : Liquid Matter Conference, Julio 2008.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lund, Suecia.

57. AUTORES: J.L. Aragonés, E.G. Noya, J.L.F. Abascal, M.M. Conde, C. Vega

Título: Properties of ices at 0K A test of water models

Tipo de participación: Charla

Congreso: CCP5 (Collaborative Computational Project 5 - The Computer Simulation of Condensed Phase)

Lugar de celebración: Sheffield (Reino Unido)

Mes: Julio Año: 2008

58. AUTORES: C.Vega,J.L.F.Abascal,M.M.Conde and J.L.Aragones

TÍTULO: What ice can teach us about water interactions : a critical comparison of the performance of different water models

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferenciante invitado.

CONGRESO : **Faraday Discussion , 141 , Agosto 2008.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Edimburgo, Reino Unido**

59. AUTORES: C.Vega,J.L.F.Abascal,M.M.Conde and J.L.Aragones
TÍTULO: **A Successful Model for the Condensed Phases of Water : TIP4P/2005**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla.**
CONGRESO : **AiCHE meeting , Noviembre 2008.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Philadelphia, USA.**

60. AUTORES: C.Vega
TÍTULO: **Simulation studies of water at the vapor-liquid, vapor-solid and liquid-solid interfaces.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Charla.**
CONGRESO : **Ice/Vapor Interface: Molecular Modeling and Experiments Ice workshop , Noviembre 2008.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Praga, Republica Checa.**

61. AUTORES: C.Vega
TÍTULO: **Estudios mediante simulacion por ordenador del diagrama de fases del agua**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada.**
CONGRESO : **Jornadas de Termodinamica, Orense Diciembre, 2008.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Orense, Espana.**

61. AUTORES: J. L. F. Abascal, M. M. Conde and J. L. Aragones
TÍTULO: **What ice can teach us about water interactions: a critical comparison of the performance of different water models**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Poster , Minneapolis, Mayo 2009.**
CONGRESO : **Workshop, Molecular Simulations: Algorithms, Analysis, and Applications**

61. AUTORES: C.Vega,J.L.F.Abascal, L.G.MacDowell, M.M.Conde, J.L.Aragones, E.G.Noya y C.McBride
TÍTULO: **Cinco años simulando el diagrama de fases del agua. Qué hemos aprendido ?**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Presentacion oral.**
CONGRESO : **Fisica Estadistica 2009 , Huelva Septiembre, 2009.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Huelva , España.**

61. AUTORES: C.Vega,J.L.F.Abascal, L.G.MacDowell, M.M.Conde, J.L.Aragones, E.G.Noya y C.McBride
TÍTULO: **Five years simulating the phase diagram of water. What we learn something ?**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Presentacion oral.**
CONGRESO : **Thermodynamics 2009 , Septiembre, 2009.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Londres, Reino Unido.**

61. AUTORES: C.Vega
TÍTULO: **Can we describe water using computer simulations ?**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia plenaria invitada (Fac.Física).**
CONGRESO : **Universidad de Roma, La Sapienza, Enero, 2010.**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Roma, Italia.**

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 : **Desde Enero 2007**

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**

Congreso: Workshop on Theory and Computer Simulation of Inhomogeneous Fluids

Lugar de celebración: Madrid

Mes: Mayo

Año: 2007

Organizadores: C. Vega (Chairman), J.L.F. Abascal (Co-Chairman) y L.G. MacDowell (Secretario)

Financiación: EU ToK contract 509249-THECOMP SIMI

Número de ponencias: 13 (9 Charlas de 45 min. y 4 de 30 min.)

Número de asistentes: 25

Página Web: <http://www.ucm.es/info/molecsim/workshop.htm>

Título : 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

ANÁLISIS DE LAS PUBLICACIONES.

Desglose por revistas. Entre paréntesis el parámetro de impacto

Revista (impacto)	Número
Physical Review Letters(6)	3
Faraday Discussion (5)	1
Journal of Chemical Physics (3.3)	66
Journal of Physical Chemistry (4)	5
Journal of Physical Chemistry B (4)	5
Journal of Physical Chemistry C (4)	2
Physical Review E (2.1)	6
Chemical Physics Letters (2.3)	2
Molecular Physics (1.85)	31
Computer Physics Communications (1.51)	1
Physical Chemistry and Chemical Physics (2.5)	8
J.Phys.Condens.Matter(1.4)	3
Fluid Phase Equilibria(0.8)	1
Journal of Molecular Liquids (1.0)	3
Computers and Chemistry (0.8)	2
Physics and Chemistry of Liquids (0.5)	1
TOTAL TRABAJOS PUBLICADOS :	140

Análisis de las citas. Actualizado Mayo 2010.

Número total de citas : 2869

Artículos con más de 100 citas : 4

Factor H (h-index) = 29

Algoritmo de búsqueda

AUTHOR: VEGA C

ADDRESS: quim fis or fac ciencias QUIM and complutense or amherst or bochum or amsterdam

Research ID: C-5455-2009 <http://www.researcherid.com/rid/C-5455-2009>

Posición mundial en el ranking de citaciones en el área de Química (Enero 2009) Periodo analizado (1999-2009).

Datos tomados del Web of Knowledge, del Science Citation Index en Enero del 2009. Posición en el ranking en Enero del 2009 :

5558 en cuanto a número total de citas

3952 en cuanto al cociente número de citas/número de artículos

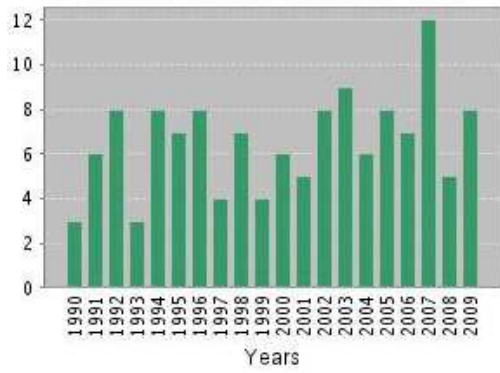
- Premio Extraordinario de Licenciatura de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid . Media del expediente : 3.91
- Primer Premio Nacional de Licenciatura en Ciencias Químicas (B.O.E del 14 Julio de 1988)
- Premio Extraordinario de Doctorado de la Facultad de Ciencias 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).

He formado parte del tribunal de tesis de los siguientes doctores

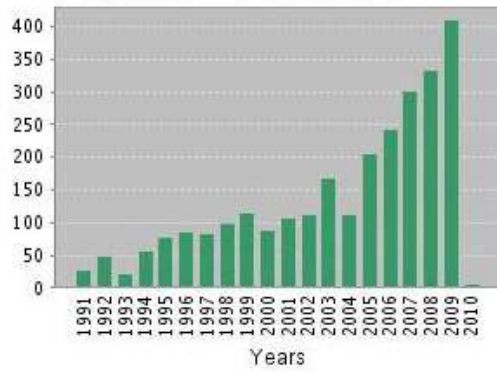
- Mercedes Taravillo UCM
- Alejandro Cuetos U.Pablo Olavide
- Maria Carolina dos Ramos U.Huelva
- Ramona Marguta U.Huelva
- Guiomar Lopez UCM
- Jose Baldomero Caballero U.Almeria
- Sonia Jorge UCM
- Josep Pamies U.Rovira y Virgili
- David de Sancho UCM
- Jose Olivier Contreras U.Rovira y Virgili
- Esther Ocaña UAM
- Ignacio Gascón U.Zaragoza
- Laura Jiménez Bonales UCM

Published Items in Each Year



The latest 20 years are displayed.

Citations in Each Year



The latest 20 years are displayed.

Results found: 135

Sum of the Times Cited [?] : 2,716
[View Citing Articles](#)
[View without self-citations](#)

Average Citations per Item [?] : 20.12

h-index [?] : 28

Figura 1: Historial de citas y publicaciones según el ISI (AUTHOR = VEGA C, ADDRESS= quim fis or fac ciencias QUIM and complutense or amherst or bochum or amsterdam)