



# **Currículum vitae**

## **Modelo normalizado**

Número de hojas que contiene: 32

Nombre: Carlos Vega de las Heras

Fecha: 8 de abril de 2014

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 curriculum 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:

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: Direccion General de Investigacion (DGI)  
DURACIÓN DESDE: Octubre 2007 HASTA: Diciembre 2010  
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 6  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2010-16159 SIMULACIONES CLASICAS Y CUANTICAS DEL AGUA Y DE SU EQUILIBRIO DE FASES*

ENTIDAD FINANCIADORA: Direccion General de Investigacion (DGI)  
DURACIÓN DESDE: Enero 2011 HASTA: Diciembre 2013  
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5  
INVESTIGADOR PRINCIPAL: CARLOS VEGA DE LAS HERAS

---

TÍTULO DEL PROYECTO: *BSCH-UCM (GR58/08 910570-797). Simulacion por ordenador y modelado mecanoestatico de liquidos y solidos*

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 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 HOMOGENEOS 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. MODELIZACION Y SIMULACION DE SISTEMAS COMPLEJOS. MO-DELICO*

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.Malijevsky 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<sub>h</sub>) 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<sub>h</sub>, 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
- 
141. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya, C.Vega , J.P.K.Doye and A.A.Louis TÍTULO: *The stability of a crystal with diamond structure for patchy particles with tetrahedral symmetry* REVISTA: J.Chem.Phys. , 132, 234511 , (2010). CLAVE: A
- 
142. AUTORES (p.o. de firma): M. M. Conde and C. Vega TÍTULO: *Determining the three-phase coexistence line in methane hydrates using computer simulations* REVISTA: J. Chem. Phys. , 133, 064507, (2010). CLAVE: A
- 
143. AUTORES (p.o. de firma): J. L. F. Abascal and C. Vega TÍTULO: *Widom line and the liquid-liquid critical point for the TIP4P/2005 water model* REVISTA: J. Chem. Phys. , 133, 234502 , (2010). CLAVE: A
- 
144. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya,L.M.Sese,R.Ramirez,C.McBride, M.M.Conde and C.Vega TÍTULO: *Path integral Monte Carlo simulations for rigid rotors and their application to water* REVISTA: Molecular Physics , 109, 149-168 , (2011). CLAVE: A
- 
145. AUTORES (p.o. de firma): E.G.Noya, C. Vega and C.McBride TÍTULO: *A quantum propagator for path-integral simulations of rigid molecules* REVISTA: J. Chem. Phys. , 134, 054117 , (2011). CLAVE: A
- 
146. AUTORES (p.o. de firma): L.J.Bonales , J.E.F.Rubio, H.Ritacco, C.Vega, R.G.Rubio and F.Ortega TÍTULO: *Freezing transition and interaction potential in monolayers of microparticles at fluid interfaces* REVISTA: Langmuir , 27, 3391-3400, , (2011). CLAVE: A
- 
147. AUTORES (p.o. de firma): D.G.Salgado, A.Dopazo-Paz, P.Gomez-Alvarez , J.M.Miguez y C. Vega TÍTULO: *Solid-solid and solid-fluid equilibria of the most popular models of methanol obtained by computer simulation* REVISTA: J. Phys.Chem.B , 115, 3522-3530 , (2011). CLAVE: A
- 
148. AUTORES (p.o. de firma): J. L. F Abascal and C. Vega TÍTULO: *Equation of state and compressibility of supercooled water: simulations and experiment* REVISTA: J. Chem. Phys. 134 186101 , (2011). CLAVE: A
- 
149. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés , L. G. MacDowell y C. Vega TÍTULO: *Dielectric constant of ices and water : a lesson about water interactions* REVISTA: J. Phys.Chem.A , 115, 5745 , (2011). CLAVE: A
- 
150. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés , L. G. MacDowell, I. J. Siepmann and C. Vega TÍTULO: *Phase diagram of water under an applied electric field* REVISTA: Physical Review Letters , 107, 155702 , (2011). CLAVE: A
- 
151. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega and J. L. F. Abascal TÍTULO: *Simulating water with rigid non-polarizable models: a general perspective* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , 13, 19663 , (2011). CLAVE: A
- 
152. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega , J. L. F. Abascal and P. G. Debenedetti TÍTULO: *Physics and Chemistry of Water and Ice* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , 13, 19660 , (2011). CLAVE: A
- 
153. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés , E. Sanz and C. Vega TÍTULO: *Solubility of NaCl in water by molecular simulation revisited* REVISTA: Journal of Chemical Physics , 136, 244508 , (2012). CLAVE: A
- 
154. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride , E.G. Noya , J.L. Aragonés , M. M. Conde and C. Vega TÍTULO: *The phase diagram of water from quantum simulations* REVISTA: Physical Chemistry Chemical Physics , 14, 10140 , (2012). CLAVE: A
-

155. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés , E. Sanz, C. Valeriani and C. Vega TÍTULO: *Calculation of the melting point of alkali halides by means of computer simulations* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 137, 104507 , (2012). CLAVE: A
- 
156. AUTORES (p.o. de firma): C.McBride , J.L. Aragonés , E.G. Noya y C. Vega TÍTULO: *A study of the influence of isotopic substitution on the melting point and temperature of maximum density of water by means of path integral simulations of rigid models* REVISTA: *Physical Chemistry Chemical Physics* , 14, 15199 , (2012). CLAVE: A
- 
157. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés , C. Valeriani and C. Vega TÍTULO: *Free energy calculations for atomic solids through the Einstein crystal/molecule methodology using GROMACS and LAMMPS* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 137, 146101 , (2012). CLAVE: A
- 
158. AUTORES (p.o. de firma): A. Reinhardt, J.P.K.Doye, E.G. Noya y C. Vega TÍTULO: *Local order parameters for use in driving homogeneous ice nucleation with all-atom models of water* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 137, 194504 , (2012). CLAVE: A
- 
159. AUTORES (p.o. de firma): G. Jimenez-Serratos , C. Vega y A. Gil-Villegas TÍTULO: *Evaluation of the pressure tensor and surface tension for molecular fluids with discontinuous potentials using the volume perturbation method* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 137, 204104 , (2012). CLAVE: A
- 
160. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega and S. Sokolowski TÍTULO: *Orest Pizio: scientist and friend Foreword* REVISTA: *CONDENSED MATTER PHYSICS* , 15, 20101 , (2012). CLAVE: A
- 
161. AUTORES (p.o. de firma): M.M.Conde y C. Vega TÍTULO: *A simple correlation to locate the three phase coexistence line in methane hydrate simulations* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 138, 056101 , (2013). CLAVE: A
- 
162. AUTORES (p.o. de firma): G. Perez-Sanchez, D.Gonzalez-Salgado, M.M.Pineiro y C.Vega TÍTULO: *Fluid-solid equilibrium of carbon dioxide as obtained from computer simulations of several popular potential models: The role of the quadrupole* REVISTA: *Journal of Chemical Physics* , 138, 084506 , (2013). CLAVE: A
- 
163. AUTORES (p.o. de firma): C. McBride, E.G.Noya y C. Vega TÍTULO: *A computer program to evaluate the NVM propagator for rigid asymmetric tops for use in path integral simulations of rigid bodies* REVISTA: *Computer Physics Communications* , 184, 885 , (2013). CLAVE: A
- 
164. AUTORES (p.o. de firma): J. B. Boreyko and B. R. Srkjanto and T. D. Nguyen and C. Vega and M. Fuentes-Cabrera and C. P. Collier TÍTULO: *Dynamic defrosting on nanostructured superhydrophobic surfaces* REVISTA: *Langmuir* , 29, 9516 , (2013). CLAVE: A
- 
165. AUTORES (p.o. de firma): G. Jimenez-Serratos and A. Gil-Villegas and C. Vega and F. J. Blas TÍTULO: *Monte Carlo simulation of flexible trimers: From square well chains to amphiphilic primitive models* REVISTA: *J. Chem. Phys.* , 139, 114901 , (2013). CLAVE: A
- 
166. AUTORES (p.o. de firma): J. R. Espinosa and E. Sanz and C. Valeriani and C. Vega TÍTULO: *On fluid-solid direct coexistence simulations: The pseudo-hard sphere model* REVISTA: *J. Chem. Phys.* , 139, 144502 , (2013). CLAVE: A
- 
167. AUTORES (p.o. de firma): E. Sanz and C. Vega and J. R. Espinosa and R. Caballero-Bernal and J.L.F. Abascal and C.Valeriani TÍTULO: *Homogeneous Ice Nucleation at Moderate Supercooling from Molecular Simulation* REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* , 135, 15008 , (2013). CLAVE: A
-



168. AUTORES (p.o. de firma): M. M. Conde and M. A. Gonzalez and J. L. F. Abascal and C. Vega TÍTULO:  
*Determining the phase diagram of water from direct coexistence simulations: The phase diagram of the TIP4P/2005  
model revisited* REVISTA: J. Chem. Phys. , 139, 154505 , (2013). 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 CLAVE: D
TEMA: Resonancia de espín electrónica de radicales			
CENTRO: Instituto de Física Atómica y Molecular			
LOCALIDAD: Amsterdam	PAÍS: Holanda	AÑO: 1987	DURACIÓN: 3 meses CLAVE: D
TEMA: Simulación por Monte Carlo de Moléculas lineales			
CENTRO: Instituto de Fluidos y Termodinámica. Universidad de Bochum.			
LOCALIDAD: Bochum	PAÍS: Alemania	AÑO: 1989	DURACIÓN: 3 meses CLAVE: D
TEMA: Dinámica molecular del refrigerante R152a mediante un ordenador vectorial			
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Cornell			
LOCALIDAD: Ithaca	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1990	DURACIÓN: 2 meses CLAVE: D
TEMA: Estudio mediante simulación de fluidos polares			
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Massachusetts.			
LOCALIDAD: Amherst	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1991-1992	DURACIÓN: 16 meses CLAVE: P
TEMA: Diagrama de fases de moléculas diatómicas: Teoría y simulación. Adsorción de fluidos en microporos: Teoría y simulación			
CENTRO: Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Massachusetts.			
LOCALIDAD: Amherst	PAÍS: Estados Unidos	AÑO: 1997	DURACIÓN: 2 meses CLAVE: O NATO COLABORATIVE GRANT
TEMA: Equilibrio líquido-sólido de moléculas con enlaces de hidrógeno			
CENTRO: Facultad de Química. Universidad Marie Curie Skolowska.			
LOCALIDAD: Lublin	PAÍS: Polonia	AÑO: 2006	DURACIÓN: 2 meses CLAVE: Proyecto Europeo MTKD-CT-2004-509249
TEMA: Estudio mediante simulación de la interfase hielo-vapor			

---

## 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 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.Rodriguez 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, Snowbird  
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.

---

62. AUTORES: J. L. F. Abascal, M. M. Conde and J. L. Aragonés  
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

---

63. 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.

---

64. 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.

---

65. AUTORES: C.Vega  
TÍTULO: Can we describe water using computer simulations ?  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria invitada (Dep.Quimica Fisica ).  
CONGRESO : Universidad de Oxford, Mayo, 2010.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oxford, UK.

---

66. 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.

---

67. AUTORES: C.Vega  
TÍTULO: Describing water using simple models.  
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria invitada (Fac.Física).  
CONGRESO : Universidad de Luxemburgo, Junio 2010.  
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Luxemburgo

---

68. AUTORES: Carlos Vega.  
TÍTULO: Crystallisation studies of water: modelling , crystal growth and nucleation

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : Cecam workshop Crystallization: from colloids to pharmaceuticals, Julio, 2010.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lausanne, Suiza.

---

69. AUTORES: Carlos Vega.

TÍTULO: What have we learnt from computer simulations of water ?

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : 8th Liblice Conference , Junio 2010.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Republica Checa.

---

70. AUTORES: J. L. F. Abascal , M. A. Gonzalez and Carlos Vega.

TÍTULO: Propiedades del agua en condiciones extremas: región subenfriada y presiones negativas

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster.

CONGRESO : FISES 2011, JUNIO , 2011.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona.

---

71. AUTORES: Carlos Vega.

TÍTULO: Properties of supercooled water as obtained from computer simulations of the TIP4P/2005 model

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : Cecam workshop Models for Bulk, Confined Water and Aqueous Solutions Upon Supercooling: State of the Art and Future Perspectives in Understanding Water Anomalies by Computer Simulations , Julio, 2011.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lausanne, Suiza.

---

72. AUTORES: Jose Luis F. Abascal , Carlos Vega y Miguel Angel González.

TÍTULO: Supercooled water: simulation and experiment

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla.

CONGRESO : 8th Liquid Matter Conference, Septiembre 2011

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Viena, Austria.

---

73. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: Computer simulations of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : Universidad de Freiburg

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Freiburg, Alemania, Marzo 2012.

---

74. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: Computer simulations of the phase diagram of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : Congreso: Statistical Physics: Modern Trends and Applications , Julio 2012.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lviv, Ucrania.

---

75. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: Computer simulations of the phase diagram of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : Imperial College, Londres, Marzo 2013.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Loncres, Reino Unido.

---

76. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: Computer simulations of the phase diagram of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : University of Wisconsin, Mayo 2013.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madison, Estados Unidos.

---

77. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: Computer simulations of the phase diagram of water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : PPEPPD , Mayo 2013 .

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Iguazu, Argentina.

---

78. AUTORES: Carlos Vega .

TÍTULO: The fluid-solid transition in simulation studies of water: thermodynamic and kinetic aspects

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla invitada.

CONGRESO : Cecam workshop New insights on simulations, theory and experiments in supercooled water, Julio 2013.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: **Lausanne, Suiza.**

---

**79. AUTORES: Carlos Vega .**

**TÍTULO: Computer simulations of the fluid-solid equilibrium of water: thermodynamic and kinetic aspects**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria invitada, Noviembre 2013.**

**CONGRESO : Universidad de Viena.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Viena, Austria.**

---

**80. AUTORES: Carlos Vega .**

**TÍTULO: Simulations of water**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria invitada. Diciembre 2013.**

**CONGRESO : Universidad de Concepcion**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Concepcion, Chile.**

---

**81. AUTORES: Carlos Vega .**

**TÍTULO: Nucleation of ice : a molecular perspective.**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla . Febrero 2013.**

**CONGRESO : Water Spain 2013.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza.**

---

**82. AUTORES: Carlos Vega .**

**TÍTULO: Theoretical studies of water: from the quantum world to simulations.**

**TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla . Octubre 2013.**

**CONGRESO : Universidad de Usty.**

**LUGAR DE CELEBRACIÓN: Usty, Republica Checa.**

**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 (Premio Extraordinario de Doctorado)**

---

**TÍTULO: SIMULACIÓN DEL EQUILIBRIO DE FASES DEL AGUA: HIELO E HIDRATOS**

**DOCTORANDO: MARÍA MARTÍN CONDE (Becario UCM)**

**UNIVERSIDAD: Universidad Complutense**

**FACULTAD/ESCUELA: Ciencias Químicas**

**AÑO: 6 de Octubre del 2011**

**CALIFICACIÓN: Apto cum laude por unanimidad (Premio Extraordinario de Doctorado)**

---

**TÍTULO: SIMULACIÓN DEL EQUILIBRIO DE FASES DEL AGUA: CRISTALES PLÁSTICOS, CONSTANTES DIELECTRICAS Y DISOLUCIONES**

**DOCTORANDO: JUAN LUIS ARAGONÉS GÓMEZ (Becario FPI)**

**UNIVERSIDAD: Universidad Complutense**

**FACULTAD/ESCUELA: Ciencias Químicas**

**AÑO: 5 de Octubre del 2012**

**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
Journal of the American Chemical Soc.(10.6)	1
Physical Review Letters(7)	4
Faraday Discussion (5)	1
Langmuir (4.5)	2
Journal of Chemical Physics (3.3)	79
Journal of Physical Chemistry (4)	6
Journal of Physical Chemistry B (3.6)	5
Journal of Physical Chemistry C (3)	2
Journal of Physical Chemistry A (2.5)	1
Physical Chemistry and Chemical Physics (3.8)	9
Physical Review E (2.1)	6
Chemical Physics Letters (2.3)	2
Molecular Physics (1.75)	32
Computer Physics Communications (1.51)	2
J.Phys.Condens.Matter(1.8)	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
<b>TOTAL TRABAJOS PUBLICADOS :</b>	<b>168</b>

Análisis de las citas. Actualizado Marzo 2014 .

Número total de citas : 5112

Artículos con más de 100 citas : 9

**Factor H (h-index) = 38**

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 en el ranking mundial de citas en el área de Química Periodo analizado (2003-2013). Datos tomados del Web of Knowledge (Essential Science Indicators), del Science Citation Index en Noviembre del 2013. Posición en el ranking mundial en el área de Química en Septiembre del 2013 :

4009 en cuanto a número total de citas

2694 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 .

- Científico seleccionado para la presentación de nominaciones al Premio Nobel de Química.
- Cuatro tramos investigadores (sexenios) concedidos. Cuatro 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.
- Desde Enero del 2014 hasta Enero del 2017 formo parte del Editorial Advisory Board de la Revista "Journal of Chemical Physics "publicada por el American Institute of Physics (AIP).
- 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 (15-20 publicaciones/año) en las revistas Journal of Chemical Physics, J. Phys. Chem. B, J.Phys.Chem. A, J. Am. Chem. Soc., Nature, 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
- Guillermo Román Pérez UAM
- Vicente Bitrián Varea UPC
- Marta Enciso Rodriguez UCM
- Oriol Romeu UAB
- Paula Vazquez U. Vigo
- Gustavo Orozco, U.Rovira y Virgili
- Nina Ramrattan, Imperial College, Londres
- Philip Geiger, Universidad de Viena
- Jorge Hernán Saavedra Molina, Universidad de Concepción, Chile

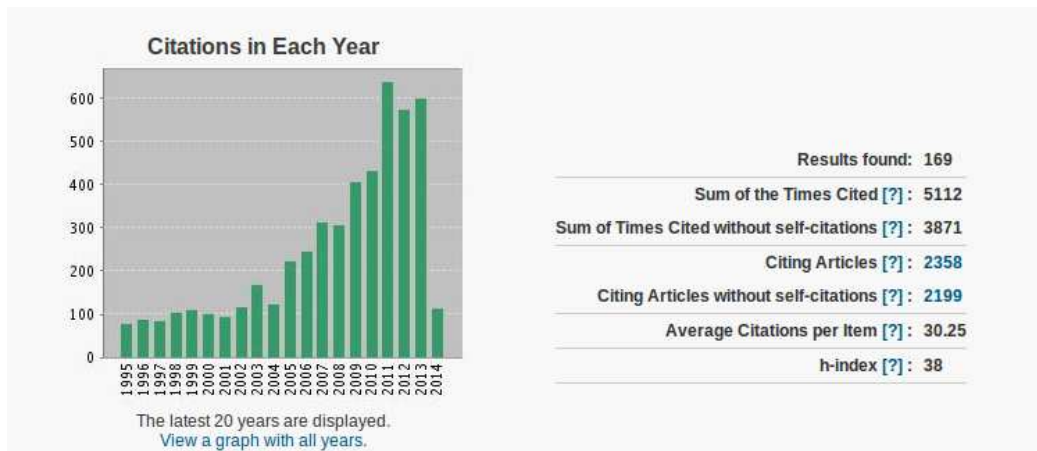


Figura 1: Historial de citas y publicaciones según el ISI ( ResearchID = C-5455-2009)