

# **PUBLICACIONES QUE HAN DERIVADO DE LA TESIS**

D. JESÚS ALGABA FERNÁNDEZ

## **Artículo**

Autores/as: J. M. Míguez, M. M. Piñeiro, J. Algaba, B. Mendiboure, J.-P. Torrè y F.J. Blas

Título: Understanding the phase behaviour of tetrahydrofuran + carbon dioxide, + methane, and + water binary mixtures from the SAFT-VR approach.

Publicado en Journal of Physical Chemistry B, 119, 14288-14302

Año de publicación: 2015

Factor de impacto de la revista en el año de publicación: 3.187

Rank 48/144 en Chemistry/Physical Q2

DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b07845

## **Artículo**

Autores/as: J. M. Garrido, J. Algaba, J. M. Míguez, B. Mendiboure, A. I. Moreno-Ventas Bravo, M. M. Piñeiro y F. J. Blas

Título: On interfacial properties of tetrahydrofuran: atomistic and coarse-grained models from molecular dynamic simulations.

Publicado en Journal of Chemical Physics, 144, 144702-10

Año de publicación: 2016

Factor de impacto de la revista en el año de publicación: 2.965

Rank 57/146 en Chemistry/Physical Q2

DOI: 10.1063/1.4945385.

## **Artículo**

Autores/as: J. Matías Garrido, M. Cartes, A. Mejía, J. Algaba, J. M. Míguez, F. J. Blas, I. Moreno-Ventas Bravo y M. M. Piñeiro.

Título: Measurement and modeling of high pressure density and interfacial tension of carbon dioxide plus tetrahydrofuran mixture.

Publicado en Journal of Supercritical Fluids, 128, 359-369

Año de publicación: 2017

Factor de impacto de la revista en el año de publicación: 3.122

Rank 60/147 en Chemistry/Physical Q2 y Rank 34/137 en Engineering/Chemical Q1

DOI: 10.1016/j.supflu.2017.04.008

## **Artículo**

Autores/as: J. Algaba, J. Matías Garrido, J. M. Míguez, A. Mejía, A. I. Moreno-Ventas Bravo y F. J. Blas

Título: Interfacial Properties of Tetrahydrofuran and Carbon Dioxide Mixture from Computer Simulation

Publicado en Journal of Physical Chemistry C, 122, 16142-16153

Año de publicación: 2018

Factor de impacto de la revista en el año de publicación: 4.484 (2017)

Rank 38/147 en Chemistry/Physical Q2, Rank 33/92 en Nanoscience & Nano technology Q2 y Rank 54/285 Materials Science/Multidisciplinary Q1

DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b04154

## **Artículo**

Autores/as: J. Algaba, J. M. Míguez, B. Mendiboure y F. J. Blas

Título: An accurate density functional theory for the vapor-liquid interface of chain molecules based on the statistical associating fluid theory for potentials of variable range for Mie chainlike fluids

Publicado en Physical Chemistry Chemical Physics 11937-11948

Año de publicación: 2019

DOI: 10.1039/C9CP01597C

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. M. Garrido, J. Algaba, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, A. Mejía y F. J. Blas.

Título contribución: Determinación de las propiedades interfaciales del tetrahidrofurano mediante Dinámica Molecular.

Título evento: II Workshop de Simulación Molecular

Ámbito: Nacional, Baiona, Pontevedra.

Fecha: Junio 2016

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, J. M. Garrido, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, A. Mejía, M. M. Piñeiro y F. J. Blas.

Título contribución: Estudio del tetrahidrofurano mediante Dinámica Molecular: Modelado y propiedades interfaciales

Título evento: XV Encuentro Inter-Bienal del grupo Especializado en Termodinámica.

Ámbito: Nacional, Huelva.

Fecha: Septiembre 2016

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, J. M. Garrido, J. M. Míguez, A. I. Moreno-Ventas Bravo, A. Mejía y F. J. Blas.

Título contribución: Vapour-liquid interfacial properties of tetrahydrofuran + carbon dioxide binary mixture from molecular dynamics simulation.

Título evento: XXI Congreso de Física Estadística.

Ámbito: Nacional, Sevilla.

Fecha: Abril 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: M. Pérez-Rodríguez, J. M. Míguez, J. Algaba, F. J. Blas y M. M. Piñeiro.

Título contribución: Computational study of the interplay between intermolecular interactions and CO<sub>2</sub> orientations in type I Hydrates.

Título evento: XXI Congreso de Física Estadística.

Ámbito: Nacional, Sevilla.

Fecha: Abril 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, J. M. Garrido, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, A. Mejía, M. M. Piñeiro y F. J. Blas.

Título contribución: Propiedades interfaciales y equilibrio de fases de la mezcla binaria THF+CO<sub>2</sub>. Comparativa entre simulación, teoría y experimentos.

Título evento: III Workshop de Simulación Molecular

Ámbito: Nacional, Baiona, Pontevedra.

Fecha: Junio 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, J. M. Garrido, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, A. Mejía, M. M. Piñeiro y F. J. Blas.

Título contribución: Estudio de las propiedades interfaciales y equilibrio de fases de la mezcla binaria THF+CO<sub>2</sub> mediante Dinámica Molecular.

Título evento: XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física.

Ámbito: Nacional, Santiago de Compostela.

Fecha: Julio 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez y F. J. Blas.

Título contribución: Vapour-liquid and liquid-liquid phase equilibria and interfacial properties of the tetrahydrofuran + methane mixture from molecular dynamics simulation.

Título evento: Thermodynamics.

Ámbito: Internacional, Edinburgh.

Fecha: Septiembre 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: D. Amador-Luna, J. M. Míguez, J. Algaba, J. M. Garrido, A. I. Moreno-Ventas Bravo y F. J. Blas.

Título contribución: Examination of the liquid-liquid interfacial properties of water + alcohol mixtures from computer.

Título evento: Thermodynamics.

Ámbito: Internacional, Edinburgh.

Fecha: Septiembre 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. M. Míguez, J. Algaba, M. M. Pineiro, J.P. Garrido y F. J. Blas.

Título contribución: Molecular Dynamics simulations of the CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> mixed hydrates.

Título evento: Thermodynamics.

Ámbito: Internacional, Edinburgh.

Fecha: Septiembre 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: A. I. Moreno-Ventas Bravo, J. M. Míguez, J. Algaba, E. Lomba y F. J. Blas.

Título contribución: Vapour-liquid interfacial tension of water + metanol mixture from molecular dynamics simulation.

Título evento: Thermodynamics.

Ámbito: Internacional, Edinburgh.

Fecha: Septiembre 2017

#### **Asistencia y contribuciones a congresos**

Autor/es: J. Algaba, J. M. Garrido, J. M. Míguez, M. Cártes, A. I. Moreno-Ventas Bravo, M. M. Piñeiro, A. Mejía y F. J. Blas.

Título contribución: Interfacial properties of the tetrahydrofuran + carbón dioxide binary mixture, a trilogy: experiments, simulation and theory.

Título evento: Thermodynamics.

Ámbito: Internacional, Edinburgh.

Fecha: Septiembre 2017

#### **Participación en Proyectos de Investigación**

Título del proyecto: Fluctuaciones en interfaces: Campos externos y gradientes de composición (FIS2013-46920-C2-1-P)

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Nacional

Investigador principal: Felipe Jiménez Blas

Fecha de duración desde 2014 hasta 2016

**Participación en proyecto de investigación.**

Título del proyecto: Red de Simulación Molecular (Redes de Excelencia FIS2015-71749-REDT).

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Nacional.

Investigador principal: Felipe Jiménez Blas

Fecha de duración desde 2015 hasta 2017

**Participación en proyecto de investigación.**

Título del proyecto: Prediction of crystallisation of hidrates of THF, THF+CH<sub>4</sub>, and THF+CO<sub>2</sub> from computer simulation.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Nacional.

Investigador principal: Felipe Jiménez Blas

Fecha de duración desde julio 2018 hasta octubre 2018