

Fecha del CVA	20/09/2021
----------------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre *	Carlos		
Apellidos *	Vega de las Heras		
Sexo *	Hombre	Fecha de Nacimiento *	28/08/1964
DNI/NIE/Pasaporte *	05264474G	Teléfono	(34) 913944202
URL Web	catalan.quim.ucm.es		
Dirección Email *	cvega@quim.ucm.es		
Identificador científico	Open Research and Contributor ID (ORCID)*	0000-0002-2417-9645	
	Researcher ID	C-5455-2009	
	Scopus Author ID	8986819600	

* Obligatorio

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Catedrático de Universidad		
Fecha inicio	2005		
Organismo / Institución	Universidad Complutense de Madrid		
Departamento / Centro	QUIMICA FISICA I / Facultad de Ciencias Químicas		
País	España	Teléfono	
Palabras clave	Simulacion numerica		

A.3. Formación académica

Grado/Master/Tesis	Universidad / País	Año
Doctor en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid / España	1991
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	1987

A.4. Indicadores generales de calidad de la producción científica

WOS

Índice H 54 , 13073 citas , 219 publicaciones , 24 artículos con más de 100 citas
Google scholar

Índice H 59 , 16557 citas , 35 artículos con más de 100 citas.

Research ID : C-5455-2009

6 tesis doctorales dirigidas (2000,2006,2011,2012,2018,2020). 3 tesis doctoral más en curso (2021,2023,2024).

5 sexenios de investigación. 6 quinquenios docentes.

Número de citas recibidas (según el WOS)

2015: 761 2016: 1008 2017: 896 2018: 1186 2019: 1229 2020: 1180

Los tres trabajos más citados (según Google Scholar):

J.L.F.Abascal y C.Vega, J.Chem.Phys., 123, 234505, (2005) : 2757 citas

J.L.F.Abascal, E.Sanz, R.G.Fernandez y C. Vega, J.Chem.Phys.,122,234511,(2005): 874 citas

C.Vega, y J.L.F. Abascal, Physical Chemistry Chemical Physics, 13, 19663,(2011): 756 citas

Artículos publicados en el periodo 2006-2021: 36

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Catedrático en Química Física desde Abril del 2005

Research ID : C-5455-2009 (13073 citas según el WOS, 16557 según Google Scholar)

Premio Extraordinario de Licenciatura(UCM).Premio Extraordinario de Doctorado(UCM)

Primer Premio Nacional de Licenciatura en Ciencias Químicas

Beca post-doctoral Fulbright

5 sexenios de investigación , 6 quinquenios docentes

Estoy situado entre los primeros 1000 investigadores españoles de todas las áreas de conocimiento

(ver detalles en www.webometrics.info/en/GoogleScholar/Spain)

Associate Editor del Journal of Chemical Physics

Miembro del Advisory Board de la Revista Molecular Physics

Pertenece a la lista de los mejores investigadores españoles de todas las áreas de conocimiento. Áreas asignadas: Química Física y Física Atómica y Molecular. La lista se encuentra en <https://grupodih.info>

Científico seleccionado para la presentación de nominaciones al Premio Nobel de Química en los años 2013 y 2017. He formado parte de tribunales de tesis en 28 ocasiones.

Seis tesis doctorales dirigidas

Luis González MacDowell (2000), Eduardo Sanz García (2006), Maria Martín Conde (2011), Juan Luis Aragonés (2012), Jorge Reñe Espinosa (2018),

Pablo Rosales Peláez (2020)

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 Artículo científico.** IM Zeron; MA Gonzalez; E Errani; C Vega; JLF Abascal. 2021. "In silico" seawater Journal of Chemical Theory and Computation. 17, pp.1715.
- 2 Artículo científico.** I Sanchez-Burgos; A Garaizar; C Vega; E Sanz; JR Espinosa. 2021. Parasitic crystallization of colloidal electrolytes:growing a metastable crystal from the nucleus of a stable phase Soft Matter. 17, pp.489.
- 3 Artículo científico.** V Bianco; P Montero de Hijos; CP Lamas; E Sanz; C Vega. 2021. Anomalous Behavior in the Nucleation of Ice at Negative Pressures Physical Review Letters. 126, pp.015704.
- 4 Artículo científico.** I Sanchez-Burgos; P Montero de Hijos; P Rosales-Pelaez; C Vega; E Sanz. 2020. Equivalence between condensation and boiling in a Lennard-Jones fluid Physical Review E. 102, pp.062609.
- 5 Artículo científico.** P Montero de Hijos; K Shi; EG Noya; EE Santiso; KE Gubbins; E Sanz; C Vega. 2020. The Young–Laplace equation for a solid–liquid interface Journal of Chemical Physics. 153, pp.191102.
- 6 Artículo científico.** V Bianco; JR Espinosa; C Vega. 2020. Antifreeze proteins and homogeneous nucleation: On the physical determinants impeding ice crystal growth Journal of Chemical Physics. 153, pp.091102.
- 7 Artículo científico.** P Montero de Hijos; JR Espinosa; V Bianco; E Sanz; C Vega. 2020. Interfacial Free Energy and Tolman Length of Curved Liquid–Solid Interfaces from Equilibrium Studies J.Phys.Chem.C. 124, pp.8795.

- 8 **Artículo científico.** S Blazquez; IM Zeron; MM Conde; JLF Abascal; C Vega. 2020. Scaled charges at work: Salting out and interfacial tension of methane with electrolyte solutions from computer simulations *Fluid Phase Equilibria*. 513, pp.112548.
- 9 **Artículo científico.** P Rosales-Pelaez; I Sanchez-Burgos; C Valeriani; C Vega; E Sanz. 2020. Seeding approach to nucleation in the NVT ensemble: The case of bubble cavitation in overstretched Lennard Jones fluids *Physical Review E*. 101, pp.022611.
- 10 **Artículo científico.** Pablo Rosales-Pelaez; MI Garcia-Cid; C Valeriani; C Vega; E Sanz. 2019. Seeding approach to bubble nucleation in superheated Lennard-Jones fluids *Physical Review E*. 100, pp.052609.
- 11 **Artículo científico.** Jorge Reñe Espinosa; Carlos Vega; Chantal Valeriani; Daan Frenkel; Eduardo Sanz. 2019. Heterogeneous versus homogeneous crystal nucleation of hard spheres *Soft Matter*. DOI: 10.1039/c9sm011.
- 12 **Artículo científico.** I. M. Zerón; J.L.F. Abascal; C. Vega. (3/3). 2019. A force field of Li^+ , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cl^- , and SO_4^{2-} in aqueous solution based on the TIP4P/2005 water model and scaled charges for the ions *The Journal of Chemical Physics*. AIP. 151, pp.134504.
- 13 **Artículo científico.** P. Montero de Hijes; J. R. Espinosa; E. Sanz; C. Vega. 2019. Interfacial free energy of a liquid-solid interface: Its change with curvature *The Journal of Chemical Physics*. AIP. 151, pp.144501.
- 14 **Artículo científico.** Montero de Hijes, P; Espinosa, JR; Vega, C; Sanz, E. 2019. Ice growth rate: Temperature dependence and effect of heat dissipation *The Journal of chemical physics*. AIP Publishing. 151-4, pp.044509-044509.
- 15 **Artículo científico.** Espinosa, Jorge R; Garaizar, Adiran; Vega, Carlos; Frenkel, Daan; Collepardo-Guevara, Rosana. 2019. Breakdown of the law of rectilinear diameter and related surprises in the liquid-vapor coexistence in systems of patchy particles *The Journal of chemical physics*. AIP Publishing. 150-22, pp.224510-224510.
- 16 **Artículo científico.** Espinosa, Jorge R; Diez, Angel L; Vega, Carlos; Valeriani, Chantal; Ramirez, Jorge; Sanz, Eduardo. 2019. Ice Ih vs. ice III along the homogeneous nucleation line *Physical Chemistry Chemical Physics*. Royal Society of Chemistry. 21-10, pp.5655-5660.
- 17 **Artículo científico.** Zubieta, Itziar; del Saz, Miguel V; Llobart, Pablo; Vega, Carlos; Noya, Eva G. 2019. Nucleation of pseudo hard-spheres and dumbbells at moderate metastability: appearance of A15 Frank-Kasper phase at intermediate elongations *Physical Chemistry Chemical Physics*. Royal Society of Chemistry. 21-4, pp.1656-1670.
- 18 **Artículo científico.** Espinosa, Jorge R; Wand, Charlie R; Vega, Carlos; Sanz, Eduardo; Frenkel, Daan. 2018. Calculation of the water-octanol partition coefficient of cholesterol for SPC, TIP3P, and TIP4P water *The Journal of chemical physics*. AIP Publishing. 149-22, pp.224501-224501.
- 19 **Artículo científico.** Zerón, IM; Vega, C; Benavides, AL. 2018. Continuous version of a square-well potential of variable range and its application in molecular dynamics simulations *Molecular Physics*. Taylor & Francis. 116-21-22, pp.3355-3365.
- 20 **Artículo científico.** Espinosa, Jorge R; Vega, Carlos; Sanz, Eduardo. (2/3). 2018. Homogeneous ice nucleation rate in water droplets *The Journal of Physical Chemistry C*. ACS Publications. 122-40, pp.22892-22896.
- 21 **Artículo científico.** GD Soria; JR Espinosa; J Ramirez; C Valeriani; C Vega; E Sanz. 2018. A simulation study of homogeneous ice nucleation in supercooled salty water *Journal of Chemical Physics*. 148, pp.222811.
- 22 **Artículo científico.** N. E. R. Zimmermann; B. Vorselaars; J. R. Espinosa; D. Quigley; W. R. Smith; E. Sanz; C. Vega; B. Peters. 2018. NaCl nucleation from brine in seeded simulations: Sources of uncertainty in rate estimates *Journal of Chemical Physics*. AIP. 148-22, pp.222838.
- 23 **Artículo científico.** A Zaragoza; JR Espinosa; R Ramos; et al;. 2018. Phase boundaries, nucleation rates and speed of crystal growth of the water-to-ice transition under an electric field: a simulation study *Journal of Physics Condensed Matter*. 30, pp.174002.

C.2. Congresos

- 1 Computer simulation of water: challenges after fifty years. Thermodynamics 2019. 2019. España. Participativo - Plenaria.
- 2 Carlos Vega. The Phase Behavior of Supercooled Water as Described by the TIP4P/ICE Model. Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions. 2019. Italia. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote.
- 3 Carlos Vega de las Heras. Homogeneous nucleation of ice from computer simulations. PPEPPD 2019 Conference. 2019. Canadá. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral).
- 4 Carlos Vega. Homogeneous nucleation of ice. CECAM Heterogeneous nucleation of ice: The Ultimate Challenge for Molecular Modelling. 2018. Suiza. Participativo - Ponencia invitada/ Keynote.
- 5 Carlos Vega de las Heras. Salts in water. Solubility, models and nucleation. TENTH LIBLICE CONFERENCE on the Statistical Mechanics of Liquids. 2018. República Checa.

C.3. Proyectos y Contratos

- 1 **Proyecto.** PID2019-105898GB-C21 ASPECTOS FUNDAMENTALES DE LA SIMULACION DE LA NUCLEACION EN MATERIA CONDENSADA. Eduardo Sanz Garcia. 01/06/2020-01/06/2023. 85.000 €.
- 2 **Proyecto.** FIS2016-78117-P MODELADO DE LA CRISTALIZACION EN DISOLUCION. Carlos Vega De las Heras. 01/01/2017-01/01/2020. 80.000 €.
- 3 **Proyecto.** FIS2013-43209-P Termodinámica y Cinética de la Transición Líquido-Sólido mediante simulación molecular: agua, disoluciones y otros sistemas. Carlos Vega de las Heras. (Universidad Complutense de Madrid). 01/01/2014-31/03/2018. 87.000 €.
- 4 **Contrato.** Marie Curie Post-doctoral fellowship (Contrato Valentino Bianco) Union Europea. 01/09/2018-01/09/2020. 130.000 €.