

Curriculum Vitae

Concurso de Acceso a Plaza de Catedrático de Universidad

Número de Concurso: 22092-P

- Área de Conocimiento: Química Física
 - Departamento: Química Física
 - Perfil Docente: Química Física
 - Perfil Investigador: Termodinámica
-

Luis González MacDowell

Profesor Titular de Universidad
Departamento de Química Física
Universidad Complutense de Madrid

Septiembre 2022

DATOS PERSONALES

APELLIDOS: González MacDowell
NOMBRE: Luis
D.N.I. 7492982L
FECHA DE NACIMIENTO: 05-03-70

SITUACIÓN PROFESIONAL ACTUAL

INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid
DEPARTAMENTO: Química Física
DIRECCIÓN POSTAL: Facultad de Ciencias Químicas, 28040, Madrid
Tfn.: 91 394 42 13
Fax.: 91 394 41 35
Correo electrónico.: lmac@quim.ucm.es
ESPECIALIZACIÓN (CÓDIGO UNESCO): 2307
PUESTO: Profesor Titular de Universidad. DURACIÓN: Indefinida.
SITUACIÓN ADMINISTRATIVA: Servicio Activo. DEDICACIÓN: Tiempo completo

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Termodinámica estadística, Simulación, Interfases, Crecimiento Cristalino, Transiciones de fase, Nucleación, Ecuaciones de estado, Polímeros.

FORMACIÓN ACADÉMICA

<u>LICENCIATURA/INGENIERÍA</u>	<u>CENTRO</u>	<u>FECHA</u>
Licenciatura en C.C. Químicas	U.C.M.	15/07/94
<u>DOCTORADO</u>		
Química-Física	U.C.M.	26/05/00

EVALUACIONES Y ACREDITACIONES

- **Acreditación Nacional para el Cuerpo de Catedráticos de Universidad** por la Rama de Ciencias, Julio 2021.
 - **Habilitación Nacional** por el Área de Química Física, Febrero 2007.
 - **Evaluación positiva I3** de la actividad investigadora por parte de la ANEP, año 2006.
 - **Acreditación ANECA para Profesor Contratado Doctor**, área de Ciencias Experimentales, año 2003.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 1996–2001**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2002–2007**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2008–2013**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2014–2019**, CNEAI.
-

1. Actividad Docente

1.1. Trayectoria Docente

Soy licenciado en Ciencias Química (1994) y Doctor en Ciencias Químicas (2000) por la Universidad Complutense de Madrid. En el año 2003 alcance la acreditación para ejercer de Profesor Contratado Doctor, y en el año 2007 superé la primera Habilitación Nacional para el cuerpo de Profesores Titulares del área de Química Física. Desde el año 2021 estoy también acreditado para el cuerpo de Catedráticos de Universidad.

Ejerczo la actividad docente regularmente desde el año 2002 y tengo cuatro Quinquenios Docentes.

Participo en programas de evaluación de la docencia desde el comienzo de mi carrera docente. Esto incluye la participación voluntaria en programas experimentales, y se mantiene de forma continuada desde la aprobación del programa oficial Docentia de la Universidad Complutense. Desde el año 2005 participo ininterrumpidamente con la evaluación de al menos una asignatura teórica en cada curso. Las evaluaciones incluyen docencia teórica y experimental, así como primero y segundo ciclo universitarios. Los resultados de las evaluaciones son en todos los casos 'Positivos' o 'Muy positivos'. Las encuestas docentes confirman una alta satisfacción de los alumnos, que suele superar el 8/10 en los epígrafes más relevantes como 'Es buen profesor' o 'Explica con claridad' y un resultado por encima de la media de la Facultad de Ciencias Químicas y de la Universidad Complutense. Estos niveles de satisfacción se confirman también en las asignaturas con docencia remota en un máster telepresencial así como en la asignatura de Química Física II que impartí durante el confinamiento. Cabe señalar adicionalmente que estos resultados se han obtenido en asignaturas teóricas de gran dificultad que abarcan la termodinámica, termodinámica estadística, cinética química, teoría cinética de gases, termodinámica de superficies, cinética electroquímica, polímeros, espectroscopía y mecánica cuántica, abarcando todos los descriptores del área de Química Física.

1.2. Dedicación a tiempo completo o tiempo parcial

Mi docencia en calidad de doctor comienza con un puesto de Investigador Ramón y Cajal, desde el 2002 hasta el 2006. Continúa como Profesor Contratado Doctor desde el 2006 hasta el 2007 tras mi acreditación a Profesor Contratado Doctor con Certificado I3 de Excelencia Investigadora. Prosigue con mi acceso al cuerpo de Profesores Titulares de Universidad en 2007, tras superar la primera prueba de Habilitación Nacional del Área de Química Física.

1.3. Número y Diversidad de Asignaturas Impartidas

He impartido docencia tanto práctica como teórica, en primer ciclo, incluyendo un 'curso cero', segundo ciclo y doctorado, totalizando 19 cursos lectivos como doctor y uno como licenciado. El grueso de mi docencia se centra en asignaturas troncales de Química Física en la Licenciatura y el Grado de Química, y en asignaturas de tercer ciclo en una amplia variedad de programas de máster y doctorado distintos.

En la Licenciatura, impartí docencia de primero, segundo, tercero y quinto curso, mayormente voluntaria durante mi periodo Ramón y Cajal. En este periodo de apenas 5 años impartí docencia teórica en Química General, Termodinámica Química, Cinética de la Reacción Química, Teoría Cinética de los Gases y Termodinámica Estadística, repartida en tres asignaturas distintas. Así mismo, impartí docencia experimental de Química General y una asignatura en el programa de doctorado de Materiales Poliméricos durante tres cursos.

En el grado de Química, en calidad de Profesor Titular, he impartido docencia en todos los cursos. Las asignaturas teóricas impartidas incluyen todas las áreas de la Química Física: Mecánica Cuántica y Teoría de Enlace, Espectroscopía Atómica y Molecular, Termodinámica, Termodinámica Estadística, Teoría Cinética de los Gases, Cinética Química, Fenómenos de Superficie, Electroquímica y Cinética Electroquímica, Polímeros y Coloides. Además he impartido docencia en los grados de Física, Bioquímica, Ingeniería Química e Ingeniería de Materiales.

En segundo ciclo de Licenciatura impartí la asignatura optativa de quinto curso 'Termodinámica Estadística' durante tres cursos en la Licenciatura de Química; y en máster he impartido las asignaturas interdisciplinarias de Biofísica Molecular y Simulación Molecular en dos programas de máster distintos.

Participo en docencia de tercer ciclo desde mi etapa de Investigador, donde he impartido asignaturas de Química Física de Polímeros y Simulación Molecular en los programas de Materiales Poliméricos y Química Física Avanzada. Además he participado en la creación del Máster en Simulación Molecular. En este máster participo en la comisión académica desde su creación, y soy también el coordinador de uno de sus tres módulos, así como profesor y coordinador de una de sus asignaturas. También participo en la Comisión Académica del Programa de Doctorado de Química Teórica y Modelización Computacional.

A modo de resumen, he impartido alrededor de 2800 horas de docencia de primer ciclo y grado y 200 horas de segundo ciclo, máster y doctorado; de las cuales 1200 horas corresponden a docencia teórica del área de química física. Además he impartido 8 Trabajos Fin de Grado, y 10 Trabajos Fin de Máster o Tesina de Licenciatura en cuatro programas diferentes. Esta actividad docente se complementa con la dirección de tres tesis doctorales, de las cuales las dos últimas tienen una producción científica excelente de al menos una decena de artículos científicos internacionales incluyendo artículos en Science, Science Advances, Nature Communications o Physical Review Letters.

1.4. Elaboración de Material Docente Original

En la mayoría de asignaturas que imparto desde algo antes del año 2010 los alumnos cuentan con unas notas de clase a su disposición. Adjunto con la documentación el documento "Curso de Química Física Macroscópico" en el que se incluyen en un solo tomo notas de Termodinámica clásica y Estadística, Cinética Química, Teoría Cinética de los Gases, Electroquímica y Polímeros que he usado para impartir distintas asignaturas de la Licenciatura y el Grado. Adjunto también unas notas que preparé para la asignatura de Dinámica Molecular Avanzada del Máster de Simulación Molecular, donde imparto el bloque de "Métodos Cuánticos".

1.5. Proyectos de innovación docente

He dirigido un proyecto de innovación docente y he participado en cuatro más.

1.6. Dirección de proyectos de fin de carrera, tesinas, master...

He dirigido 8 trabajos TFG y 10 trabajos de TFM o Tesina de Licenciatura, repartidos entre la Licenciatura y tres programas de máster distintos, de los cuales siete dieron lugar a publicaciones en revistas científicas internacionales.

1.7. Otros méritos relacionados con la actividad docente

He participado en algún curso de formación del profesorado y he impartido ocasionalmente alguna conferencia en cursos de verano.

2. Actividad Investigadora

2.1. Publicaciones Científicas

Mi investigación se centra en la actualidad en la química física de las interfases de fluidos moleculares. Como herramientas metodológicas, utilizo y desarrollo técnicas de simulación molecular, así como modelos teóricos basados en la termodinámica estadística. Desde el año 2010, en el que comienzo a dirigir proyectos de investigación del plan nacional, desarrollo esta línea de modo completamente independiente en calidad de Investigador Principal y Autor Correspondiente en la mayoría de los artículos. Pasada alrededor de una década de esta investigación, la madurez científica y la reputación en el área han frugado los últimos años en la mejor producción de mi carrera, con la publicación de artículos en las revistas Science, Nature Communications, Science Advances, y Physical Review Letters.

Hasta la fecha he publicado alrededor de un centenar de artículos en revistas científicas internacionales indexadas. A modo de perfil, los últimos 60 artículos podemos indicar:

- 46 artículos en el primer tercil.
- 38 artículos con 4 o menos autores (14 de ellos como primer autor y otros 5 como autor único).
- 28 artículos de autor correspondiente.
- 35 artículos financiados con fondos de proyectos en los que soy Investigador Principal.

Se recogen a continuación una lista de cuatro artículos significativos:

P. Llombart, E. G. Noya y L. G. MacDowell, “Surface Phase Transitions and Crystal Habits of Ice in the Atmosphere”, *Science Advances*, vol. 6. no. 21. eaay9322 (2020). El crecimiento cristalino del hielo, que determina la forma y el tamaño de los copos de nieve en la atmósfera, ha cobrado enorme relevancia debido a la amenaza del cambio climático. En este trabajo llevamos a cabo unas simulaciones del hielo a gran escala en la infraestructura Mare Nostrum, el mayor superordenador de España. Nuestras simulaciones nos permitieron dar explicación por primera vez al complejo Diagrama de Nakaya, que describe los hábitos cristalinos del hielo atmosférico en función de la temperatura y la humedad.

Nuestro trabajo ha sido publicado en la revista *Science Advances*, que figura como la cuarta revista más importante en el área de ‘Ciencia Multidisciplinar’, con un factor de impacto de 13. Desde su publicación hace dos años el trabajo recoge 18 citas en GS y 16 en WoS.

En calidad de autor correspondiente del artículo, dirigí la solicitud de tiempo de cálculo en el Mare Nostrum (QCM-2017-2-0008, QCM-2017-3-0034). Así mismo, en calidad de co-IP del proyecto FIS2017-89361-C3-2-P que lo financia y de co-director de la tesis doctoral de Pablo Llombart, mi contribución consistió en el diseño de la metodología, la interpretación de los resultados y la redacción íntegra del artículo. Con este mismo papel, en esta misma línea, publicamos ese mismo año un artículo en *Physical Review Letters*, que figura en el puesto 6/84 en el área de física multidisciplinar, con factor de impacto 8.4, y que tiene 13/11 citas en (GS/WoS); Así como otro en *Nature Communications*, que figura en el puesto sexto del área de Ciencia Multidisciplinar con impacto 12.1 y que lleva 8/15 citas en (Gs/WoS). Esta producción nos afianza como un grupo experto en el estudio de crecimiento cristalino y la estructura interfacial del hielo.

G. González-Rubio, J. Mosquera, V. Kumar, A. Pedraza-Tardajos, P. Llombart, D. Sols, I. Lobato, E.G. Noya, A. Guerrero-Martinez, J. Taboada, F. Obelleiro, L.G.MacDowell, S. Bals, and L. M. Liz-Marzan. “Micelle-directed chiral seeded growth on anisotropic gold nanocrystals” *Science*, vol. 368, no. 6498, 1472-1477 (2020). La síntesis de nanopartículas con actividad óptica tiene un enorme potencial en el diseño de catalizadores y sondas enantioselectivas. En este trabajo se propuso un método de síntesis de nanopartículas con actividad óptica excepcional. La explicación del mecanismo de amplificación cooperativa de quiralidad del proceso de síntesis fue corroborado por los resultados de simulaciones moleculares realizadas por mi equipo de investigación. En estas simulaciones se observa que la binamina puede transmitir su quiralidad a la capa de surfactantes adsorbidos sobre el oro. Como resultado, se forma una capa de adsorción en forma de espiral que permite guiar el proceso de deposición del metal sobre la superficie del oro, generando nanotornillos con propiedades ópticas excepcionales.

En calidad de co-IP del proyecto FIS2017-89361-C3-2-P que lo cofinancia, y de co-director de la tesis de Pablo Llombart, mi papel en este artículo fue el de diseñar la metodología de simulación, la interpretación de los resultados y la redacción del texto del artículo asociado a las simulaciones.

El artículo fue publicado en la revista *Science*, que ocupa el puesto número dos en el área de Ciencia Multidisciplinar, con un parámetro de impacto de casi 42. Google Scholar recoge ya 102 citas, y Web of Science 88. Este trabajo consolida la línea de investigación de adsorción de surfactantes que abro en 2017, al unirme en calidad de co-IP al Grupo de Investigación de Nanoquímica. En esta misma línea, donde estudiamos en detalle el proceso de interacción de surfactantes sobre la superficie del oro, publicamos ya en 2017 un artículo en *Science*, con 218/177 citas hasta la fecha; así como otro en *ACS Nano*, en 2019, con 88/66 citas hasta la fecha. Estos tres artículos confirman ampliamente el acierto de esta cooperación y su potencial en futuras investigaciones.

J. Benet, P. Llombart, E. Sanz y L. G. MacDowell, “Premelting-induced smoothening of the ice-vapor interface”. *Physical Review Letters*, vol. 117, no. 9, 096101 (2016). A baja temperatura, el crecimiento cristalino sobre un sólido es un proceso activado, de carácter epitaxial. A alta temperatura, por el contrario, es un proceso gradual de deposición atómica sin activación. En este trabajo, documentamos la primera observación mediante técnicas de simulación de la llamada transición de ‘rugosidad’ entre estos dos regímenes de crecimiento cristalino. De esta manera, dimos un primer paso a la explicación del cambio de forma de los cristales de nieve en función de la temperatura, que explicamos en un trabajo posterior.

En calidad de IP del proyecto FIS2010-22047-C05-05 que financió el trabajo, y de co-director de las tesis de Jorge Benet y Pablo Llombart, concebí enteramente el proyecto, diseñé el método de análisis, formulé completamente la teoría que ayudó a interpretar los resultados y redacté íntegramente el artículo.

El artículo fue publicado en *Physical Review Letters*, históricamente la revista más prestigiosa del área de física multidisciplinar (a la sazón en el puesto 6 de 79) con un impacto de 8.46. El artículo cuenta con 39 citas en google scholar y 31 en Web of Science. Además, con este trabajo di comienzo a toda una línea de investigación sobre el crecimiento cristalino del hielo, con vistas a la mejor comprensión de las propiedades del hielo atmosférico y su papel en el cambio climático.

L.G. J. Benet, N.A. Katcho, J.M.G. Palanco, “Disjoining pressure and the film-height-dependent surface tension of thin liquid films: New insight from capillary wave fluctuations” *Advances in colloid and interface science* 206, 150-171 (2014). La adsorción de un líquido sobre un sustrato es un fenómeno de enorme relevancia en todas las áreas de la química-física de superficies. En este artículo de revisión, realizado por invitación expresa de los editores, recopilamos el estado del arte en el área y presentamos un resumen de nuestros propios trabajos de simulación. En particular, revisamos medidas sistemáticas de la tensión superficial líquido-vapor de películas nanoscópicas adsorbidas realizados por mi equipo mediante técnicas de simulación. Estos resultados nos sirvieron para demostrar por primera vez que la tensión superficial de una interfase líquido-vapor depende de la distancia de la interfase al sustrato a la que está adsorbida. La revisión recoge nuestras propias simulaciones, así como la primera explicación teórica del fenómeno propuesta por nosotros mismos.

Esta revisión sintetiza el esfuerzo de 3 años de mi proyecto FIS2010-22047-C05-05. En calidad de IP del proyecto, autor correspondiente y director de las tesis de J. Benet y J.M.G Palanco, redacté íntegramente el artículo de revisión y propuse una nueva teoría para la explicación de la dependencia de la tensión superficial con la distancia de la interfase líquido-vapor al sustrato.

El artículo fue publicado en la prestigiosa revista *Advances in colloid and interface science*, que figura en el puesto 16 de 139 revistas en el área de Química Física, con un factor de impacto 7.78. Hasta la fecha, cuenta con 46 citas según Google Scholar y 33 según Web of Science.

2.2. Ponencias y comunicaciones a congresos

He tenido la oportunidad de difundir mis resultados de investigación oralmente en unas treinta conferencias, de las cuales algunas por invitación. De entre estas, destacar la invitación este año a la reunión "Structure and Dynamics of Ice Surfaces", en el Telluride Research Center fundado por Stephen Berry; así como invitaciones a sendas reuniones del CECAM, en 2016 y en 2020 (esta última suspendida por causa de la pandemia).

El mayor reconocimiento en este sentido no obstante es la impartición en tres ocasiones (2006, 2014, 2017) de conferencias contribuidas al congreso Liquid Matter Conference, de carácter trianual, que es el más importante del área en Europa y que posiblemente sea el caso de mayor participación de un investigador español.

En el año 2001 participé en un congreso en Princeton. Visitando la sala Kandinski del Museo de Arte Moderno de Nueva York coincidí casualmente con mi compañera de estudios la Dra. Cabañas. En el 2005 coincidí con la Dra. Cabañas en un congreso en Benarés, India. Paseando por las estrechas calles de la ciudad de repente, hubo un tumulto.

2.3. Dirección y participación en proyectos competitivos de investigación

He sido Investigador Principal único del proyecto “Modelización Jerárquica de la Interfase en Sistemas Confinados” FIS2010-22047-C05-05, del Plan Nacional, financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación,

y dotado con 30.000 €, desde 01/01/2011 hasta 31/08/2014 . En este proyecto coordinado con otros cuatro grupos nacionales de prestigio internacional se publicaron un total de 19 artículos científicos en revistas científicas internacionales, incluidos artículos en *Physical Review Letters* y *Advances in Colloids and Surfaces*, integrados en una tesis doctoral del a la sazón doctorando Jorge Benet Villanueva. A pesar de estos resultados la agencia de evaluación me denegó la siguiente solicitud, truncando la posibilidad de mantener una línea con financiación independiente.

Como indicios adicionales de mi independencia investigadora, el currículum recoge también mi participación como co-IP en otro proyecto más del plan nacional, además de varios proyectos de tiempo de computación en el superordenador Mare-Nostrum y dos proyectos para jóvenes investigadores obtenidos en convocatorias competitivas de la Universidad Complutense.

He realizado toda mi labor investigadora desde su comienzo en el año 1996 con financiación de proyectos competitivos a escala autonómica, nacional o europea, incluidos varios del plan nacional, generalmente con escasa financiación; así como otros en convocatorias de excelencia a nivel autonómico y otro más financiado con fondos del VI Programa Marco de la Unión Europea.

Desde la formalización de los Grupos de Investigación Complutense he realizado mi trabajo de investigación en su seno, primero dentro del Grupo de Simulación por Ordenador de Líquidos y Sólidos, y desde el año 2017 en el grupo de Nano-Química-Física, del que fui co-IP durante 4 años.

2.4. Dirección y Participación en otros Proyectos y Contratos de Investigación

En dos ocasiones participé en contratos de colaboración con la multinacional BASF. El primero durante mi estancia postdoctoral, el segundo como investigador Ramón y Cajal. En esta última edición el responsable de BASF se desentendió de la colaboración una vez conseguido mi código de ecuación de estado de disoluciones de polímeros elaborado durante varios años.

Así mismo he participado en la fundación de la Red de Simulación Molecular, que ha sido financiada en varias ocasiones mediante Acciones Integradas.

2.5. Dirección de Tesis Doctorales

En 2011 tuve la oportunidad única en mi carrera de dirigir una tesis a un alumno con aspiraciones a beca FPU. Aunque era el mejor expediente de la Facultad de Ciencias Químicas, le fue denegada por falta de méritos de su director. Desde entonces he dirigido tres tesis doctorales, una en calidad de único director, y otras dos, co-dirigidas. La primera tesis resultó en tres publicaciones en revistas científicas internacionales; la segunda en siete; y la tercera en diez. Entre los trabajos publicados se encuentran artículos en *Advances in Colloid and Interface Science*, *Physical Review Letters*, *Science Advances*, *Nature Communications* o *Science*.

2.6. Transferencia de conocimiento al sector productivo

Salvo por el código de ecuación de estado de polímeros que el Dr. Frank Heilmann se quedó para uso particular en BASF, no tengo experiencia en transferencia.

2.7. Estancias en Centros de Investigación

Gran parte de mi carrera se ha realizado en el marco de colaboraciones internacionales, esto incluye visitas a varios centros extranjeros, siempre con las miras puestas a la complementariedad de marcos conceptuales y pluridisciplinariedad de mi actividad investigadora.

Mi estancia postdoctoral la realice en la Universidad Johannes Gutenberg de Mainz por invitación expresa del Profesor Kurt Binder (Medalla Max Planck y Medalla Boltzmann) y Marcus Müller, tras realizar una estancia predoctoral de tres meses.

Durante mi periodo de Ramón y Cajal visité regularmente Mainz, y también realicé visitas a la Universidad Marie Curie-Sklodowska en Lublin, Polonia.

Recientemente hice una visita de seis meses al Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Loughborough, con el fin de poner a punto técnicas matemáticas para la modelización de la superficie del hielo

que darían posteriormente lugar a la publicación de un artículo en *Physical Review Letters* y otro en *Nature Communications*. La estancia fue financiada por el plan de movilidad de Investigadores Senior del Ministerio de Educación.

2.8. Colaboraciones Internacionales

He mantenido a lo largo de toda mi carrera colaboraciones internacionales, primero en el contexto del post-doc, luego más o menos de modo espontáneo con investigadores reputados de universidades prestigiosas como Imperial College, Norwegian University of Science and Technology, Universidad de Nueva York, Universidad de Johannes Gutenberg o Universidad Libre de Bruselas, así como otras colaboraciones con investigadores de la Universidad Maria Curie-Sklodowska, de Lublin, la Universidad de Bio-Bio, en Chile y la Universidad de Loughborough en Reino Unido.

Además mantengo también colaboraciones nacionales con investigadores del CSIC, la Universidad Autónoma de Madrid o la Universidad de Huelva.

2.9. Otros Méritos Relacionados con la Actividad Investigadora

Desde mi estancia postdoctoral colaboro al acervo científico con labores de revisión de artículos en revistas científicas internacionales de calidad. La lista incluye revisiones realizadas en revistas de máximo prestigio, tales como *Accounts of Chemical Research*, *Nature Communications* o *Physical Review Letters* (primer decíl), además de revisiones habituales en el *Journal of Chemical Physics*, *Physical Review E*, *Langmuir*, etc. todas ellas prestigiosas revistas de gran arraigo en la química física y dentro del primer tercil de impacto. De acuerdo al portal Publons, mi actividad de revisión está en el percentil 95.

También he revisado ocasionalmente proyectos de investigación, generalmente de agencias de evaluación internacionales.

3. Experiencia en Gestión Académica y Científica

Tengo la suerte de tener buenos gestores entre mis compañeros, ya que la gestión no es mi fuerte.

Mi única actividad de gestión reseñable fue el trabajo oficioso de representación del colectivo de Investigadores Ramón y Cajal durante el periodo de su implantación y hasta las primeras estabilizaciones. Pienso que el programa Ramón y Cajal ha sido el cambio más significativo de la universidad española y que debería ser galardonado con el Premio Príncipe de Asturias.

Además he sido miembro de comisiones académicas de un programa de doctorado y un programa de máster durante algunos años.

1. Actividad Docente

1.1. LA TRAYECTORIA DOCENTE

FORMACIÓN ACADÉMICA

<u>LICENCIATURA/INGENIERÍA</u>	<u>CENTRO</u>	<u>FECHA</u>
Licenciatura en C.C. Químicas	U.C.M.	15/07/94
<u>DOCTORADO</u>		
Química-Física	U.C.M.	26/05/00

TESIS DOCTORAL

-
- **TÍTULO DE LA TESIS:** Termodinámica Estadística de Moléculas Flexibles: Teoría y Simulación
 - **CALIFICACIÓN:** Sobresaliente cum Laude y Mención Europea
 - **DIRECTOR(ES) DE TESIS:** Dr. Carlos Vega de las Heras
-

ACREDITACIONES DOCENTES

-
- **Acreditación Nacional** para el Cuerpo de Catedrático de Universidad por la Rama de Ciencias, Julio de 2021.
 - **Habilitación Nacional** por el Área de Química Física, Febrero 2007.
 - **Acreditación ANECA** para **Profesor Contratado Doctor**, área de Ciencias Experimentales, año 2003.
-

QUINQUENIOS DOCENTES

-
- **Evaluación positiva de la actividad docente, tramo 2002–2007, CNEAI.**
 - **Evaluación positiva de la actividad docente, tramo 2007–2012, CNEAI.**
 - **Evaluación positiva de la actividad docente, tramo 2012–2017, CNEAI.**
 - **Evaluación positiva de la actividad docente, tramo 2017–2022, CNEAI.**

EVALUACIONES DOCENTES

Curso	Estudios	Asignatura	Evaluación
18/19 – 20/21	Grado en Química	-	Positiva
15/16 – 17/18	Grado en Química	-	Muy Positiva
15/16	Grado en Química	Química Física II	Muy Positiva
14/15	Grado en Química	Química Física II	Positiva
12/13	Grado en Química	Química Física II	Positiva
11/12	Grado en Química	Química Física II	Positiva
11/12	Grado en Química	Química Física I	Positiva
10/11	Grado en Química	Química Física I	Positiva
09/10	Licenciatura en Química	Ampliación de Química Física	Positiva
08/09	Licenciatura en Química	Termodinámica Química	Positiva
08/09	Licenciatura en Química	Termodinámica Química	Positiva
05/06	Licenciatura en Química	Química Física I	Positiva

ENCUESTAS DOCENTES

Curso	Estudios	Asignatura	Evaluación*
21/22	Grado en Química	Operaciones Básicas de Laboratorio	9,25 / 10
21/22	Grado en Química	Química Física II	8,07 / 10
20/21	Grado en Química	Operaciones Básicas de Laboratorio - Remoto	4,75 / 10
20/21	Grado en Química	Química Física II	7,38 / 10
19/20	Máster en Simulación	Dinámica Molecular Avanzada	4,75 / 5
19/20	Grado en Química	Operaciones Básicas de Laboratorio	8,11 / 10
19/20	Grado en Química	Química Física II	8,50 / 10
18/19	Máster en Simulación	Dinámica Molecular Avanzada	4,43 / 5
18/19	Grado en Química	Química Física II	7,50 / 10
18/19	Grado en Química	Operaciones Básicas de Laboratorio	7,7 / 10
17/18	Grado en Química	Química Física II	8,46 / 10
16/17	Grado en Química	Química Física II	7,86 / 10
15/16	Grado en Química	Química Física II	4,36 / 5
14/15	Grado en Química	Química Física II	4,21 / 5
12/13	Grado en Química	Química Física II	4,05 / 5
11/12	Grado en Química	Química Física II	4,3 / 5
11/12	Grado en Química	Química Física I	3,88 / 5
09/10	Licenciatura en Química	Ampliación de Química Física	4,18 / 5
08/09	Licenciatura en Química	Termodinámica Química	4,74 / 5
08/09	Licenciatura en Química	Termodinámica Química	4,45 / 5
05/06	Licenciatura en Química	Química Física I	4,35 / 5
03/04	Licenciatura en Física	Química General	5,0 / 7
02/03	Licenciatura en Física	Química General	4,8 / 7

*: valoración global de acuerdo a la pregunta “Considero que el trabajo del profesor es satisfactorio” o “Estoy satisfecho con la labor docente del profesor”, según la encuesta.

1.2. DEDICACIÓN A TIEMPO COMPLETO O PARCIAL EN LA UNIVERSIDAD

PUESTOS A TIEMPO COMPLETO EN LA UNIVERSIDAD

- FECHAS: Noviembre de 2007 hasta la fecha.
PUESTO: **Profesor Titular de Universidad.**
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación y docencia.
- FECHAS: Noviembre de 2006 a Noviembre de 2007
PUESTO: **Profesor Contratado Doctor**
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación y docencia.
- FECHAS: Junio de 2002 a Octubre de 2006
PUESTO: **Investigador Ramón y Cajal** - Docencia Voluntaria
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación y docencia.
- FECHAS: Junio de 2000 a Mayo de 2002
PUESTO: **Investigador Postdoctoral**
INSTITUCIÓN: Universidad Johannes Gutenberg, Mainz, Alemania.
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación
- FECHAS: Mayo de 1996 a Diciembre de 1999
PUESTO: **Becario Predoctoral**
INSTITUCIÓN: Universidad Complutense de Madrid
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación
- FECHAS: Noviembre de 1995 a Abril de 1996
PUESTO: **Becario Predoctoral**
INSTITUCIÓN: Universidad Libre de Bruselas
ACTIVIDAD DESARROLLADA: Investigación

1.3. NÚMERO Y DIVERSIDAD DE ASIGNATURAS IMPARTIDAS

DOCENCIA EN LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
1998-99	Becario predoctoral	Introducción a la Experimentación Química	Licenciatura en Química	1º	Práctica	15	15
2002-2003	Investigador Ramón y Cajal	Química	Licenciatura en Física	1º	Teoría	45	75
		Introducción a las Técnicas Instrumentales	Licenciatura en Química	2º	Práctica	30	
2003-2004	Investigador Ramón y Cajal	Química	Licenciatura en Física	1º	Teoría	45	120
		Introducción a las Técnicas Instrumentales	Licenciatura en Química	2º	Práctica	60	
		Química	Licenciatura en Física	1º	Práctica	15	
2004-2005		Química Física de Macromoléculas	Programa Interuniversitario de "Materiales Poliméricos"	Doctorado	Teórica	10	125
		Elementos de Química	Licenciatura en Físicas y Geológicas	"0º"	Teórica	45	
		Introducción a la Experimentación Química	Licenciatura en Química	1º	Práctica	60	
2005-2006	Investigador Ramón y Cajal	Química Física de Macromoléculas	Programa Interuniversitario de "Materiales Poliméricos"	Doctorado	Teórica	10	135
		Modelización Molecular	Programa Interuniversitario de "Química Física Aplicada"	Doctorado	Teoría	20	
		Química Física I	Licenciatura en Química	2º	Teórica	45	
		Introducción a las Técnicas Instrumentales	Licenciatura en Química	2º	Práctica	60	

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
2006-2007	Investigador Ramón y Cajal	Química Física de Macromoléculas	Programa Interuniversitario de "Materiales Poliméricos"	Doctorado	Teórica	10	100
		Termodinámica Estadística	Licenciatura en Química	5º	Teoría	45	
		Introducción a la Experimentación Química	Licenciatura en Química	1º	Práctica	22.5	
		Introducción a las Técnicas Experimentales	Licenciatura en Química	1º	Práctica	22.5	
2007-2008	Prof. Titular de Universidad	Modelización Molecular	Programa Interuniversitario de "Química Física Aplicada"	Doctorado	Teoría	20	87,5
		Termodinámica Estadística	Licenciatura en Química	5º	Teoría	45	
		Introducción a la Experimentación Química	Licenciatura en Química	1º	Práctica	22.5	
2008-2009	Prof. Titular de Universidad	Modelización Molecular	Programa Interuniversitario de "Química Física Aplicada"	Doctorado	Teoría	20	167
		Tesina de Licenciatura	Licenciatura en Química	5º	Teórica	15	
		Principios de Termodinámica Química	Licenciatura en Química	3º	Teórica	45	
		Principios de Termodinámica Química	Licenciatura en Química	3º	Teórica	45	
		Introducción a la Experimentación Química	Licenciatura en Química	1º	Práctica	42	
2009-2010	Prof. Titular de Universidad	Tesina de Licenciatura	Licenciatura en Química	5º	Teórica	15	125
		Química Física I	Grado en Química	2º	Teórica	38	
		Ampliación de Química Física	Licenciatura en Química	3º	Teórica	45	

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	27	
2010-2011	Prof. Titular de Universidad	Trabajo Fin de Máster	Máster en Ciencia y Tecnología Química	Máster	Teórica	15	205
		Química Física I	Grado en Química	2º	Teórica	84	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	36	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	
2011-2012	Prof. Titular de Universidad	Tesina de Licenciatura	Licenciatura en Química	5º	Teórica	15	193
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	30	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Teórica	30	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	36	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	
		Química	Grado en Física	1º	Práctica	12	
2012-2013	Prof. Titular de Universidad	Trabajo Fin de Máster	Máster en Ciencia y Tecnología Química	Máster	Teórica	15	217
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	90	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	
2013-2014	Prof. Titular de Universidad	Trabajo Fin de Grado	Grado en Química	4º	Teórica	30	223
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Práctica	33	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	36	
		Termodinámica y Cinética Química	Grado en Ingeniería Química	2º	Práctica	12	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
2014-2015	Prof. Titular de Universidad	Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	206
		Química II	Grado en Ingeniería de Materiales	2º	Práctica	56	
		Termodinámica y Cinética Química	Grado en Ingeniería Química	2º	Práctica	36	
		Informática Aplicada a la Química	Grado en Química	1º	Práctica	60	
		Química	Grado en Física	1º	Práctica	12	
2015-2016	Prof. Titular de Universidad	Modelización Molecular	Grado en Química	4º	Teórica	6	126
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	36	
		Termodinámica y Cinética Química	Grado en Ingeniería Química	2º	Práctica	12	
		Informática Aplicada a la Química	Grado en Química	1º	Práctica	30	
2016-2017	Prof. Titular de Universidad	Trabajo Fin de Grado	Grado en Química	4º	Teórica	15	215
		Trabajo Fin de Grado	Grado en Ingeniería de Materiales	4º	Teórica	15	
		Tutor de Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Modelización Molecular	Grado en Química	4º	Teórica	3	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Práctica	56	
		Termodinámica y Cinética Química	Grado en Ingeniería Química	2º	Práctica	36	
		Informática Aplicada a la Química	Grado en Química	1º	Práctica	30	
Química	Grado en Física	1º	Práctica	13			

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
2017-2018	Prof. Titular de Universidad	Biofísica Molecular	Máster en Física Biomédica	Máster	Teórica	7,5	164
		Tribunal Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Práctica	56	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	54	
2018-2019	Prof. Titular de Universidad	Tribunal Trabajo fin de grado	Grado en Química	4º	Teórico	10	164
		Trabajo fin de grado	Grado en Química	4º	Teórico	10	
		Tutor de Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	27	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	
2019-2020	Prof. Titular de Universidad	Trabajo fin de grado	Grado en Química	4º	Teórico	10	186
		Tutor de Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	27	
		Tutorías de Química	Grado en Bioquímica	1º	Teórica	6	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	70	
		Química	Grado en Física	1º	Práctica	26	

Curso académico	Puesto ocupado	Asignatura	Titulación	Curso de la titulación	Teoría/ Práctica	Nº horas totales (impartidas por el interesado)	Total horas impartidas por curso académico / cuatrimestre
2020-2021	Prof. Titular de Universidad	Trabajo fin de grado	Grado en Química	4º	Teórico	10	181
		Tutor de Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Tut. Prog. Física para BioCiencias	Grado en Bioquímica	1º	Teórica	12	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	29	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Práctica	56	
		Química Física I	Grado en Química	2º	Práctica	27	
2021-2022	Prof. Titular de Universidad	Trabajo fin de grado	Grado en Química	4º	Teórico	10	170
		Tutor de Prácticas en Empresa	Grado en Química	4º	Teórico/ Práctica	5	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Teórica	42	
		Operaciones Básicas de Laboratorio	Grado en Química	1º	Práctica	41	
		Química Física II	Grado en Química	3º	Práctica	60	
		Termodinámica y Cinética Química	Grado en Ingeniería Química	2º	Práctica	12	

Resumen de Docencia en la Universidad Complutense

- Horas de primer ciclo y grado: 2807
- Horas de segundo ciclo, máster y doctorado: 187,5
- Horas de docencia teórica: 1241,5
- Trabajos fin de máster y Tesinas de Licenciatura: 5
- Trabajos Fin de Grado: 8

DOCENCIA IMPARTIDA EN OTRAS UNIVERSIDADES

**Docencia en el Máster de Simulación Molecular
de la Universidad Internacional de Andalucía - Universidad de Huelva**

Curso	Puesto	Asignatura	Horas
2018/2019	Profesor Titular	Dinámica Molecular Avanzada	1,5
2019/2020	Profesor Titular	Dinámica Molecular Avanzada	1,5
2020/2021	Profesor Titular	Dinámica Molecular Avanzada	1,5
2021/2022	Profesor Titular	Dinámica Molecular Avanzada	1,5

1.4 ELABORACIÓN DE MATERIAL DOCENTE ORIGINAL

TÍTULO: Curso de Química Física Macroscópica

DESCRIPCIÓN: Notas de distintas asignaturas de Química Física del departamento elaboradas entre los cursos 2005/2006 y 2020/2021.

Contiene:

- Química Física I (Termoquímica, teoría cinética y cinética química), curso 2005/2006, Licenciatura en Química.
- Principios de Termodinámica Química, curso 2008/2009, Licenciatura en Química.
- Química Física II, 1^{er} Cuatrimestre (Termoquímica, Termo Estadística, Teoría Cinética), curso 2011/2012, Grado en Química.
- Química Física II, 2^o Cuatrimestre (Cinética Química, Superficies, Electroquímica, Polímeros y Coloides) Grado en Química.

AUTOR: Luis González MacDowell

TÍTULO: Dinámica Molecular Avanzada: Métodos Cuánticos

DESCRIPCIÓN: Notas para la asignatura de Dinámica Molecular Avanzada, del Máster en Simulación Molecular elaboradas en el curso 2018/2019.

Contiene:

- Principios de Mecánica Cuántica.
- Aproximación de Born-Oppenheimer.
- Teoría DFT de la estructura electrónica.
- Formalismo Path Integral.

AUTOR: Luis González MacDowell

1.5 PROYECTOS DE INNOVACIÓN DOCENTE

DIRECCIÓN DE PROYECTOS DE INNOVACIÓN DOCENTE

1. TÍTULO DEL PROYECTO: Termodinámica Estadística

APORTACIÓN: Desarrollo de un plan docente de la asignatura “Termodinámica Estadística” de acuerdo a los criterios de Convergencia Europea al Plan Bolonia.

UNIVERSIDAD: Oficina de Convergencia Europea - Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2007/2008

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INNOVACIÓN DOCENTE

1. TÍTULO DEL PROYECTO: Formación en Química Sostenible y su Relación con los Objetivos del Desarrollo Sostenible

DIRECTOR: Albertina Cabañas Poveda

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2021/2022

2. TÍTULO DEL PROYECTO: Digitalización del Laboratorio de Química Física I

APORTACIÓN: Digitalización de dos prácticas de laboratorio

DIRECTOR: Andrés Guerrero Martínez y Cristina Díaz Blanco

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2020/2021

3. TÍTULO DEL PROYECTO: Prospección sobre un posible programa multidisciplinar e internacional de postgrado en el ámbito de la Biofísica

DIRECTOR: Francisco Monroy Muñoz

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2015/2016

4. TÍTULO DEL PROYECTO: Laboratorio Integrado de Prácticas de Simulación de Fundamentos y Procesos Químicos con Fluidos Supercríticos

DIRECCIÓN: Lourdes Calvo Garrido

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2016/2017

1.6 DIRECCIÓN DE PROYECTOS FIN DE CARRERA, TESIS, TRABAJOS FIN DE MÁSTER, DEAS

PROYECTOS DE LICENCIATURA Y MASTER

1. AUTOR: Diego Martín-Albo Rodríguez-Escalona
TÍTULO DEL PROYECTO: Transiciones de fase en Membranas de Esfingomiolina
PROGRAMA: Máster en Simulación Molecular.
UNIVERSIDAD: Universidad Internacional de Andalucía.
CURSO: 2020/2021 CALIFICACIÓN: 8
DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell
Co-DIRECCIÓN: Pablo Llombart González.

2. AUTOR: Juan Luengo Márquez
TÍTULO DEL PROYECTO: Van der Waals forces at ice surfaces with atmospheric interest.
PROGRAMA: Máster en Física de la Materia Condensada y los Sistemas Biológicos.
UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid.
CURSO: 2019/2020 CALIFICACIÓN: 9,8
PUBLICACIÓN: Luengo y MacDowell, "Lifshitz theory of wetting films at three phase coexistence: The case of ice nucleation on Silver Iodide (AgI)", J. Colloid Interface Science, 590, 527-538 (2021).
DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

3. AUTOR: Jose Ignacio Otero Bueno
TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio de la superficie del hielo con técnicas de dinámica molecular y análisis mediante el parámetro de orden q_6 y el algoritmo CHILL+
PROGRAMA: Máster en Simulación Molecular UNIVERSIDAD: Universidad de Huelva
CURSO: 2019/2020 CALIFICACIÓN: 7,5
DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell
Co-DIRECCIÓN: Pablo Llombart González

4. AUTOR: Ramón María Bergua López
TÍTULO DEL PROYECTO: Study of the Ice-Vapor Interface in Nitrogen Atmosphere
PROGRAMA: Máster en Física de la Materia Condensada y los Sistemas Biológicos.
UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid.
CURSO: 2017/2018 CALIFICACIÓN: 9
PUBLICACIÓN: Llombart, Bergua, Noya y MacDowell "Structure and Water Attachment Rates of Ice in the Atmosphere: Role of Nitrogen", Phys.Chem.Chem.Phys. **21** 19594 (2019).
DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell
Co-DIRECCIÓN: Pablo Llombart González.

5. AUTOR: Pablo Llombart González.

TÍTULO DEL PROYECTO: Estructura de la Interfase Hielo-Vapor en las proximidades del punto triple

PROGRAMA: Máster en Física de la Materia Condensada y los Sistemas Biológicos.

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid.

CURSO: 2014/2015

CALIFICACIÓN: 9,5

PUBLICACIÓN: Benet, Llombart, Sanz y MacDowell "Premelting-Induced Smoothing of the Ice-Vapor Interface" Phys. Rev. Lett. 117, 096101 (2016).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

6. AUTOR: Victor Hernández Elvira

TÍTULO DEL PROYECTO: Determinación de las Interacciones Electroestáticas de la Doble Capa

PROGRAMA: Máster en Ciencia y Tecnología Química

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2012/2013

CALIFICACIÓN: 9

PUBLICACIÓN: Elvira y MacDowell, "Damped reaction field method for the accelerated convergence of the real space Ewald summation", J. Chem. Phys. 141, 164108 (2014).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

7. AUTOR: Victor Hernández Elvira

TÍTULO DEL PROYECTO: Evaluación de Interacciones de Largo Alcance en la Interfase eléctrica

PROGRAMA: Licenciatura en Ciencias Químicas - Tesina

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2011/2012

CALIFICACIÓN: 9

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

8. AUTOR: Jorge Benet Villanueva

TÍTULO DEL PROYECTO: Adsorción de Argon sobre dióxido de carbono sólido estudiada mediante simulación

PROGRAMA: Licenciatura en Ciencias Químicas - Tesina

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2010/2011

CALIFICACIÓN: 9,2

PUBLICACIÓN: de Gregorio, Benet, Katcho, Blas y MacDowell "Semi-infinite boundary conditions for the simulation of interfaces: The Ar/CO(s) model revisited", J. Chem. Phys. 136, 104703 (2012).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

9. AUTOR: Jorge Benet Villanueva

TÍTULO DEL PROYECTO: Simulación Molecular de la Tensión Superficial del Etano

PROGRAMA: Licenciatura en Ciencias Químicas - Tesina

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2009/2010

CALIFICACIÓN: 9,3

PUBLICACIÓN: Benet, MacDowell y Menduiña “Liquid-Vapor Phase Equilibria and Surface Tension of Ethane As Predicted by the TraPPE and OPLS Models ”, J. Chem. Eng. Data **55**, 5465 (2010).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

10. AUTOR: Rocio de Gregorio

TÍTULO DEL PROYECTO: Cálculo de la Temperatura de Wetting en el Sistema CO₂/Ar.

PROGRAMA: Licenciatura en Ciencias Químicas - Tesina

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid

CURSO: 2008/2009

CALIFICACIÓN: 9,0

PUBLICACIÓN: de Gregorio, Benet, Katcho, Blas y MacDowell “Semi-infinite boundary conditions for the simulation of interfaces: The Ar/CO(s) model revisited”, J. Chem. Phys. 136, 104703 (2012).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

PROYECTOS FIN DE GRADO

1. AUTOR: David Pedrosa Cano.

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelo Cuántico de Juguete para la Autodisociación del Agua

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2021/2022

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

2. AUTOR: Laura López Esteban

TÍTULO DEL PROYECTO: Crecimiento Cristalino del Hielo en la Atmósfera PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2020/2021

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

3. AUTOR: Ricardo Carrasco Herrera

TÍTULO DEL PROYECTO: Simulación Molecular de Nanopartículas de Oro

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2019/2020

PUBLICACIÓN:

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

co-DIRECCIÓN: Pablo Llombart González

4. AUTOR: Juan Luengo Márquez

TÍTULO DEL PROYECTO: Fuerzas de van der Waals en la Superficie del Hielo

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2018/2019

PUBLICACIÓN: Luengo, Izquierdo-Ruiz y MacDowell, “”, J. Chem. Phys. (2022).

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

5. AUTOR: Sara Román Sánchez

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelación y Simulación del Crecimiento Cristalino

PROGRAMA: Grado en Ciencia de los Materiales.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2016/2017

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

6. AUTOR: Ramón María Bergua López

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelado y Simulación del Crecimiento Cristalino

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

2016/2017CURSO:

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

7. AUTOR: Victor Primo Cano

TÍTULO DEL PROYECTO: Simulación Molecular de Mezclas de Coloides Melenudos y Polímeros

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2013/2014

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

8. AUTOR: Pablo Llombart González

TÍTULO DEL PROYECTO: Simulación Molecular de Panqueques de Argon adsorbidos sobre CO₂

PROGRAMA: Grado en Química.

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense de Madrid.

CURSO: 2013/2014

DIRECCIÓN: Luis G. MacDowell

1.7 OTROS MERITOS RELACIONADOS CON LA ACTIVIDAD DOCENTE

CURSOS DE FORMACIÓN

CENTRO: Universidad Internacional de Andalucía
LOCALIDAD: Docencia Remota PAÍS: España AÑO: 2018 DURACIÓN: 2 créditos
TÍTULO: Autoproducción de vídeos educativos para elearning.

CENTRO: Instituto de Ciencias de la Educación, ICE/UCM.
LOCALIDAD: Madrid PAÍS: España AÑO: 2002 DURACIÓN: 16 horas
TÍTULO: El Asesoramiento Académico en la Enseñanza Universitaria.

AYUDAS Y BECAS

- FINALIDAD: Programa Estatal de Promoción del Talento y su Empleabilidad en I+D+i (movilidad).
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación, Cultura y Deporte.
DURACIÓN: 5 meses, Agosto 2017 a Diciembre de 2017.
CENTRO O INSTITUCIÓN: Loughborough University, Loughborough, Reino Unido.
- FINALIDAD: Bolsa de viaje complutense.
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid
DURACIÓN: 5 días, Junio de 2008.
CENTRO O INSTITUCIÓN: Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.
- FINALIDAD: Asistencia al congreso *Disorder, Complexity and Biology*
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid
DURACIÓN: 5 días, Julio de 2004.
CENTRO O INSTITUCIÓN: Banaras Hindu University, Varanasi.
- FINALIDAD: Asistencia al congreso *Solid/Fluid Interfaces*
ENTIDAD FINANCIADORA: European Science Foundation
DURACIÓN: 5 días, Marzo de 2003.
CENTRO O INSTITUCIÓN: Sede de la European Science Foundation en San Feliu de Guixols, Girona.
- FINALIDAD: Estancia breve en la Universidad Johannes-Gutenberg, Mainz, Alemania.
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid.
DURACIÓN: Tres meses, de Octubre a Diciembre de 1998.
CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg, Mainz.
- FINALIDAD: Realización de una tesis doctoral
ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid

DURACIÓN: Cuatro anualidades, de Mayo de 1996 a Diciembre de 2000.

CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Química-Física, Universidad Complutense

- FINALIDAD: Estancia predoctoral

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Asuntos Exteriores

DURACIÓN: 6 meses, de Noviembre de 1995 a Abril de 1996

CENTRO O INSTITUCIÓN: Departamento de Materia Condensada, Universidad Libre de Bruselas

IMPARTICIÓN DE CURSOS DE VERANO

CENTRO: Universidad de Huelva

LOCALIDAD: La Rábida PAÍS: España

AÑO: 2012

DURACIÓN: 2 horas

TÍTULO: I Escuela de Simulación Molecular

CENTRO: Universidad de Huelva

LOCALIDAD: La Rábida PAÍS: España

AÑO: 2015

DURACIÓN: 2 horas

TÍTULO: II Escuela de Simulación Molecular

2. Actividad Investigadora

- REVISTA: J. of Colloid and Interface Sci. **590** 527-538 (2021). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 9.965 7
8. AUTORES (p.o. de firma): V. Estesó, S. Carretero-Palacios, L.G. MacDowell, J. Fiedler, D. F. Parsons, F. Spallek, H. Míguez, C. Persson, S. Y. Buhmann, I. Brevik y M. Boström.
 TÍTULO: Premelting of ice adsorbed on a rock surface
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **22** 11362–11373 (2020). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3.430 10
9. AUTORES (p.o. de firma): P. Llombart, E. G. Noya, D. N. Sibley and A. J. Archer y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Rounded Layering Transitions on the Ice Surface.
 REVISTA: Physical Review Letters, **124** 065702 (2020). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 8.385 10
10. AUTORES (p.o. de firma): P. Llombart, E. G. Noya y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Surface phase transitions and crystal habits of ice in the atmosphere
 REVISTA: Sci. Adv. **6** eaay9322 (2020). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 13.117 15
11. AUTORES (p.o. de firma): G. Gonzalez-Rubio, M. Mosquera, V. Kumar, A. Pedraza-Tardajos, P. Llombart, D. Solis, I. Lobato, E. G. Noya, A. Guerrero-Martinez, J. Taboada, F. Obelleiro, L. G. MacDowell, S. Bals, y L. M. Liz-Marzán
 TÍTULO: Micelle-directed chiral seeded growth on anisotropic gold nanocrystals
 REVISTA: Science **368**, 1472–1477 (2020). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 41.846 86
12. AUTORES (p.o. de firma): P. Llombart, R. Bergua, E. G. Noya y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Structure and water attachment rates of ice in the atmosphere: role of nitrogen
 REVISTA: Phys.Chem.Chem.Phys. **21**, 19594–19611 (2019). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3.430 7
13. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell
 TÍTULO: Surface van der Waals forces in a nutshell
 REVISTA: J. Chem. Phys. **150**, 081101 (2019). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 2.991 12
14. AUTORES (p.o. de firma): G. Gonzalez-Rubio, V. Kumar, P. Llombart, P. Diaz-Nuñez, E. Bladt, T. Altantzis, S. Bals, O. Peña-Rodríguez, E. G. Noya, L. G. MacDowell, A. Guerrero-Martinez y L. M. Liz-Marzán
 TÍTULO: Disconnecting Symmetry Breaking from Seeded Growth for the Reproducible Synthesis of High Quality Gold Nanorods
 REVISTA: ACS-Nano **13**, 4424–4435 (2019). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 14.588 66

15. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, P. Llombart, E. Sanz y L.G. MacDowell
TÍTULO: Structure and fluctuations of the premelted liquid film of ice at the triple point
REVISTA: Molecular Physics **117**, 2846–2864 (2019). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
No 1.767 7
16. AUTORES (p.o. de firma): P. Llombart, L.G. MacDowell y E. G. Noya.
TÍTULO: Structural transitions and bilayer formation of CTAB aggregates.
REVISTA: Colloids and Surfaces A **580**, 123730 (2019). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
No 3.990 9
17. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, P. Llombart, J. Benet, J.G. Palanco, A. Guerrero-Martinez.
TÍTULO: Nanocapillarity and Liquid–Bridge Mediated Force between Nanoparticles
REVISTA: ACS-Omega **3**, 112–123 (2018). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
No 2.584 8
18. AUTORES (p.o. de firma): A. Nold, L.G. MacDowell, D. N. Siblye, B. D. Goddard and S. Kalliadasis.
TÍTULO: The vicinity of an equilibrium three-phase contact line using density-functional theory: density profiles normal to the fluid interface
REVISTA: Molecular Physics **116**, 2239–2243 (2018). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
No 1.571 3
19. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell
TÍTULO: Capillary wave theory of adsorbed liquid films and the structure of the liquid-vapor interface.
REVISTA: Phys. Rev. E. **96**, 022801 (2017). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
Si 2.284 10
20. AUTORES (p.o. de firma): González-Rubio, Diaz-Nuñez, Rivera, Prada, Tardajos, Gonzalez-Izquierdo, Bañares, Llombart, L.G. MacDowell, Alcolea Palafox, Liz-Marzan, Peña-Rodriguez and Guerrero-Martinez.
TÍTULO: Femtosecond Laser Reshaping Yields Gold Nanorods with Ultranarrow Surface Plasmon Resonances.
REVISTA: Science **358**, 640–644 (2017). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
Si 41.058 173
21. AUTORES (p.o. de firma): F. J. Martinez-Ruiz, F. J. Blas, A. I. M. V. Bravo, J. M. Miguez y L.G. MacDowell
TÍTULO: Vapour-liquid interfacial properties of square-well chains from density functional theory and Monte Carlo simulation
REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 12296–12309 (2017). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
Si 3.906 10
22. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, P. Llombart, E. Sanz y L.G. MacDowell
TÍTULO: Premelting-Induced Smoothing of the Ice-Vapor Interface
REVISTA: Phys. Rev. Lett. **117**, 096101 (2016). CLAVE: A
IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
Si 8.462 30

23. AUTORES (p.o. de firma): E. M. Fernández, E. Chacón, L.G. MacDowell y P. Tarazona
 TÍTULO: Mesoscopic Hamiltonian for the fluctuations of adsorbed Lennard-Jones liquid films
 REVISTA: Phys. Rev. E. **91**, 062404 (2015). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2.35 4
24. AUTORES (p.o. de firma): J. G. Palanco y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Analytic perturbative FMSA equation of state and thermodynamic properties from Monte Carlo simulation of the Kihara potential with a spherical core
 REVISTA: Mol. Phys. En prensa. CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1.72 6
25. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz
 TÍTULO: Interfacial Free Energy of the NaCl Melt Interface from Capillary Wave Fluctuations.
 REVISTA: J. Chem. Phys. **142**, 134706 (2015). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2.95 8
26. AUTORES (p.o. de firma): Victor H. Elvira y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Damped reaction field method for the accelerated convergence of the real space Ewald summation.
 REVISTA: J. Chem. Phys. **141**, 164108 (2014) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2.95 4
27. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, J. G. Palanco, E. Sanz y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Disjoining Pressure, Healing Distance, and Film Height Dependent Surface Tension of Thin Wetting Films.
 REVISTA: J. Phys. Chem. C **118**, 22079-22089 (2014). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 4.77 15
28. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz
 TÍTULO: Computer simulation study of surface wave dynamics at the crystal–melt interface.
 REVISTA: J. Chem. Phys. **141**, 034701 (2014). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2.95 23
29. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y E. Sanz
 TÍTULO: A Study of the ice-water interface using the TIP4P/2005 water model
 REVISTA: Phys. Chem. Chem. Phys. DOI: 10.1039/C4CP03398A (2014). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 4.49 36
30. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, Jorge Benet, Nebil A. Katcho y Jose M. G. Palanco.
 TÍTULO: Disjoining Pressure and the Film-Height-Dependent Surface Tension of Thin Liquid Films: New Insight from Capillary Wave Fluctuations
 REVISTA: Adv. Colloid Interface Sci. **206**, 150–171 (2014). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 7,78 33

31. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Ignacio Moreno-Ventas Bravo, J. Algaba, F. J. Martínez-Ruiz y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Effect of Molecular Flexibility of Lennard-Jones Chains on Vapor-Liquid Interfacial Properties.
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **140**, 114705 (2014). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2,95 11
32. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, Jorge Benet y Nebil A. Katcho.
 TÍTULO: Capillary Fluctuations and Film-Height-Dependent Surface Tension of an Adsorbed Liquid Film
 REVISTA: Physical Review Letters **111**, 047802 (2013). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 7,73 24
33. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Ignacio Moreno-Ventas Bravo, J. Miguez, M. M. Piñero y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Vapor-liquid interfacial properties of rigid-linear Lennard-Jones chains
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **137**, 084706 (2012). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,16 21
34. AUTORES (p.o. de firma): Felipe J. Blas, Francisco J. Martínez-Ruiz, Ignacio Moreno-Ventas Bravo y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Universal scaling behaviour of surface tension of molecular chains
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **137**, 024702 (2012). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,16 14
35. AUTORES (p.o. de firma): Rocio de Gregorio and Jorge Benet and Nebil A. Katcho and Felipe J. Blas L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Semi-infinite boundary conditions for the simulation of interfaces: The Ar/CO₂(s) model revisited
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **136**, 104703 (2012). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,16 19
36. AUTORES (p.o. de firma): P. Bryk y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Solvation effects for polymers at an interface: A hybrid self-consistent field-density functional theory approach
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **135**, 204901 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,33 13
37. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Computer simulation of interface potentials: Towards a first principle description of complex interfaces?
 REVISTA: European Physical Journal-Special Topics **197**, 131-145 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,56 20

38. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Discussion Notes on “Disjoining pressure of planar adsorbed films”, by JR Henderson
 REVISTA: European Physical Journal-Special Topics**197**, 149–150 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,56 3
39. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Discussion Notes: Remark on contributions by Binder, Marmur and Sefiane
 REVISTA: European Physical Journal-Special Topics**197**, 245-247 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,56 -
40. AUTORES (p.o. de firma): J. L. Aragonés, L.G. MacDowell, J. I. Siepman and C. Vega.
 TÍTULO: Phase Diagram of Water under an Applied Electric Field.
 REVISTA: Physical Review Letters **107**, 155702 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 7,37 39
41. 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: Journal of Physical Chemistry-A , **115**, 5745-5758 (2011). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 2,95 89
42. AUTORES (p.o. de firma): J. Benet, L.G. MacDowell y C. Menduiña.
 TÍTULO: Liquid–Vapor Phase Equilibria and Surface tension of Ethane as Predicted by the TraPPE and OPLS models.
 REVISTA: Journal of Chemical & Engineering Data **55**, 5465-6470 (2010) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 2,09 15
43. 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: Journal of Physical Chemistry B **114**, 6089–6098 (2010) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,60 31
44. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y F.J. Blas.
 TÍTULO: Surface tension of fully flexible Lennard-Jones chains: Role of long-range corrections
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **131**, 074705 (2009) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,09 43
45. AUTORES (p.o. de firma): B. Mognetti, P. Virnau, L. Yelash, W. Paul, K. Binder, M. Muller y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Coarse Grained Models for Fluids and their Mixtures: Comparison of Monte Carlo Studies of their Phase Behavior with Perturbation Theory and Experiment.
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **130**, 044101 (2009) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,09 47

46. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, B. Mognetti, L.G. MacDowell, M. Oettel, W. Paul, P. Virnau, L. Yelash.
 TÍTULO: Towards the Quantitative Prediction of the Phase Behavior of Polymer Solutions by Computer Simulation
 REVISTA: Macromolecular Symposia **278**, 1–9 (2009) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No - 5
47. AUTORES (p.o. de firma): B. Mognetti, P. Virnau, L. Yelash, W. Paul, K. Binder, M. Muller y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Coarse Graining Dipolar Interactions in Simple Fluids and Polymer Solutions: Monte Carlo Studies of the Phase Behavior
 REVISTA: Physical Chemistry–Chemical Physics **11**, 1923–1933 (2009) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 4,12 10
48. AUTORES (p.o. de firma): F.J. Blas, L.G. MacDowell, E. de Miguel y G. Jackson.
 TÍTULO: Vapor-liquid interfacial properties of fully flexible Lennard-Jones chains
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **129**, 144703 (2008) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,149 67
49. AUTORES (p.o. de firma): P. Bryk y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Self-consistent field/density functional study of conformational properties of polymers at interfaces: Role of intramolecular interactions
 REVISTA: Journal of Chemical Physics, **129**, 104901 (2008) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,149 19
50. AUTORES (p.o. de firma): B.M. Mognetti, L. Yelash, P. Virnau, W. Paul, K. Binder, M. Müller y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Efficient prediction of thermodynamic properties of quadrupolar fluids from simulation of a coarse-grained model: The case of carbon dioxide.
 REVISTA: Journal of Chemical Physics **128**, 104501 (2008) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,149 43
51. AUTORES (p.o. de firma): J. L. F. Abascal, R. Garcia Fernandez, L.G. MacDowell, E. Sanz y C. Vega.
 TÍTULO: Ice, a Fruitfull Source of Information about Liquid Water
 REVISTA: Journal of Molecular Liquids **136** 214-220 (2007) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 0,982 16
52. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y P. Bryk.
 TÍTULO: Direct calculation of interfacial tensions from computer simulation: Results for freely jointed tangent hard sphere chains.
 REVISTA: Physical Review E **75**, 061609 (2007) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 2,483 46

53. AUTORES (p.o. de firma): M. Martín-Conde, L.G. MacDowell y C. Vega.
 TÍTULO: Computer simulation of two new solid phases of water: ice XIII and ice XIV
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 116101, **125** (2006) CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,166 16
54. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y M. Müller
 TÍTULO: Adsorption of Polymers on a Brush: Tuning the Order of the Wetting Transition
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 084907, **124** (2006) . CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,166 60
55. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, V. K. Shen y J. R. Errington.
 TÍTULO: Nucleation and cavitation of spherical, cylindrical and slablike droplets and bubbles in small systems
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, 034705, **125** (2006), seleccionado en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, **14** (2006). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,166 112
56. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, M. Müller, P. Virnau y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Polymer+solvent systems: Phase diagrams, interface free energies, and nucleation
 REVISTA: Advances in Polymer Science, 1–104, **173** (2005). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 4,319 64
57. AUTORES (p.o. de firma): C. McBride, C. Vega, E. Sanz, L.G. MacDowell, y J. L. F. Abascal.
 TÍTULO: The range of meta stability of ice-water melting for two simple models of water.
 REVISTA: Molecular Physics. 1–5, **103** (2005). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,351 48
58. 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: J. Phys. Condens. Matter, S3283–S3288 **17** (2005). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 2,145 92
59. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y M. Müller.
 TÍTULO: Observation of Autophobic Dewetting on Polymer Brushes from Computer Simulation
 REVISTA: J. Phys. Condens. Matter, S3523–S3528 **17** (2005). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 2,145 29
60. AUTORES : C. Vega, L.G. MacDowell, C. McBride, F. J. Blas, A. Galindo y E. Sanz.
 TÍTULO: Molecular Modeling of Flexible Molecules. Vapor–Liquid and Fluid–Solid Equilibria
 REVISTA: Journal of Molecular Liquids **113**, 37–51 (2004). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,057 12

91. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, C. Vega y A. López Rodríguez
 TÍTULO: Critical properties of mixtures of alkanes from perturbation theory
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics, **111**, 3183–3191 (1999). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,289 7
92. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, L.G. MacDowell, A. López Rodríguez
 TÍTULO: Excess properties of mixtures of alkanes from perturbation theory
 JOURNAL: The Journal of Chemical Physics, **111**, 3192–3202 (1999). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,289 12
93. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell
 TÍTULO: On the calculation of the frequency sum rules of the heat flux correlation function
 REVISTA: Molecular Physics. **96**, 881–884 (1999). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,774 3
94. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y C. Vega
 TÍTULO: The second virial coefficients of hard alkane models
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **109**, 5670–5680 (1998). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,147 22
95. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y C. Vega
 TÍTULO: Vapour-Liquid equilibrium of linear and branched alkanes from perturbation theory
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **109**, 5681–5690 (1998). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,147 15
96. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, F. Guillaume, J.-P. Ryckaert, P. Girard, V. Rodriguez,
 A.-J. Dianoux
 TÍTULO: Rotational molecular Dynamics in the R1 Phase of n-Nonadecane
 REVISTA: Physica-B **234**, 106–108 (1997). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 0.991 6
97. AUTORES (p.o. de firma): S. Calero, B. Garzón, L.G. MacDowell, y S. Lago
 TÍTULO: Nonequilibrium properties of linear polar Kihara fluids from molecular dynamics. Results for
 models and for liquid acetonitrile
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **107**, 2034–2045 (1997). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,247 14
98. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell, B. Garzón, S. Calero y S. Lago
 TÍTULO: Dynamical Properties and Transport Coefficients of Linear Kihara Fluids
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **106**, 4753–4767 (1997). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,247 10

99. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, B. Garzón, L.G. MacDowell, S. Calero y S. Lago
 TÍTULO: The Vapour-Liquid Equilibrium of n-Alkanes
 REVISTA: Journal of Physics-Condensed Matter **8**, 9643–9648 (1996). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,487 4
100. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, L.G. MacDowell y P. Padilla
 TÍTULO: Equation of State for Hard n-Alkane Models: Long Chains
 REVISTA: The Journal of Chemical Physics **104**, 701–713 (1996). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 Si 3,516 27
101. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega y L.G. MacDowell
 TÍTULO: Understanding the Critical Properties of Chain Molecules
 REVISTA: Molecular Physics **88**, 1575–1602 (1996). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,581 25
102. AUTORES (p.o. de firma): C. Vega, B. Garzón, L.G. MacDowell y S. Lago
 TÍTULO: Vapour Liquid Equilibria of Propane and n-alkane Conformers
 REVISTA: Molecular Physics **85**, 679–699 (1995). CLAVE: A
 IMPACTO EN EL 1/4 SUPERIOR DEL AREA/AÑO IMPACTO N° DE CITAS
 No 1,827 6
-

OTRAS PUBLICACIONES

1. AUTORES (p.o. de firma): K. Binder, W. Paul, P. Virnau, L. Yelash, M. Müller y L.G. MacDowell.
 TÍTULO: From atomistic modeling of macromolecules towards equations of state for polymer solutions and melts: how important is the accurate description of the local structure.
 LIBRO: Coarse-Graining of Condensed Phases and Biomolecular Systems (G. Voth, Editor), 399-414, (2008). CRC-Press
 CLAVE: CL
2. AUTORES (p.o. de firma): M. Müller, C. Pastorino, T. Kreer, K. Binder L.G. MacDowell.
 TÍTULO: Polymer Droplet on Top of a Brush of Chemically Identical Molecules: Autophobic Dewetting and Motion of Droplets Under External Force on a Soft Substrate
 REVISTA: Abstracts of Papers of the American Chemical Society 416, **231** (2006) CLAVE: A
3. AUTORES (p.o. de firma): L.G. MacDowell y P. Virnau.
 TÍTULO: El intrigante lazo de Van der Waals
 REVISTA: Anales de la Real Sociedad Española de Química, 19–29, **101** (2005). CLAVE: A
4. AUTORES (p.o. de firma): P. Virnau, L. G. MacDowell, M. Müller and K. Binder
 TÍTULO: How Do Droplets Depend on the System Size ? Droplet Condensation and Nucleation in Small Simulation Cells
 REVISTA: Transactions of the High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS) 2003, E. Krause, W. Jäger and M. Resch ed., p. 125–135, Springer-Verlag, Berlin (2003). CLAVE: CL

1.2. PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS (Incluye solo contribuciones orales a cargo del autor)

1. AUTORES: L. Baran, P. Llombart, W. Rzyško y L. G. MacDowell
TÍTULO: **On Slippery Ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral.
CONGRESO: *Joint European/Japanese Molecular Liquids Group Annual Meeting 2022.*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, España.
2. AUTORES: L. G. MacDowell
TÍTULO: **Surface Structure and Crystal Growth of Ice in the Atmosphere.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *Structure and Dynamics of Ice Surfaces. Telluride Research Center.*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Telluride, Estados Unidos.
3. AUTORES: Pablo Llombart, David Sibley, Eva G. Noya, Andrew Archer y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Growth rates of ice in the atmosphere: from premelting films to crystal habits.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *CECAM Flagship Workshop on Metastability and Multiscale Effects in Interfacial Phenomena*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lausana, Suiza.
AÑO: 2020 (aplazada a 2023).
4. AUTORES: Juan Luengo y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **The cross-over from London (non-retarded) to Casimir (retarded) van der Waals interactions in three and four layered media.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *CMD2020GEFES*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.
AÑO: 2020.
5. AUTORES: P. Llombart, D. N. Sibley, E. G. Noya, A.J. Archer y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Water droplets on ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *Roma Tre Congress on Water under Extreme Conditions*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Roma, Italia.
AÑO: 2019
6. AUTORES: P. Llombart, D. N. Sibley, E. G. Noya, A.J. Archer y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Water droplets on ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *10th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Srni, República Checa.
AÑO: 2018

7. AUTORES: P. Llombart, J. Benet, E. Sanz y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Observation of a roughening Transition on the Surface of Ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *Liquid Matter Conference 2017*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Liubliana, Eslovenia.
AÑO: 2017
8. AUTORES: P. Llombart, J. Benet, E. Sanz y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Observation of a roughening Transition on the Surface of Ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *Waterspain 2017-ZCAM*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, España.
AÑO: 2017
9. AUTORES: P. Llombart, J. Benet, E. Sanz y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Roughening Transition on the Surface of Ice**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *FisEs 2017*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sevilla, España.
AÑO: 2017
10. AUTORES: L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Statistical Mechanics of Interfaces, I, II y III.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *Micro and Macro approaches for fluid/fluid and solid/fluid interfaces (coWet Marie Curie Initial Training Network)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.
AÑO: 2016
11. AUTORES: L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Capillarity Theory at the Nanoscale**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia.
CONGRESO: *Non-equilibrium Dynamics of Thin Films – Solids, Liquids and Bioactive Materials (CE-CAM Workshop)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lausana, Suiza.
AÑO: 2016
12. AUTORES: L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Capillarity Theory at the Nanoscale**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *Energy-Materials-Nanotechnology Meeting on Droplets 2016*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Sebastián, España.
AÑO: 2016

13. AUTORES: P. Bryk y L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Combined Self-Consistent-Field Density Functional Theory study of polymer solvation at an interface.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada.
CONGRESO: *Theory and Computer Simulation of Polymers: New Developments*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Halle, Alemania.
AÑO: 2015
14. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho y J. M. G. Palanco.
TÍTULO: **Capillary fluctuations, disjoining pressure and the film height dependent surface tension of adsorbed liquid films**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *9th Liquid Matter Conference (EPS)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa, Portugal.
AÑO: 2014
15. AUTORES: Victor H. Elvira, L. G. MacDowell.
TÍTULO: **Accelerated Convergence of the Real Space Ewald Summation**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *9th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sec Dam Lake, Republica Checa.
AÑO: 2014
16. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho y J. M. G. Palanco.
TÍTULO: **Capillary fluctuations, interface potential and the film height dependent surface tension of adsorbed liquid films**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *The Physics of Soft and Biological Matter (IOP)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cambridge, Reino Unido.
AÑO: 2014
17. AUTORES: L. G. MacDowell, J. Benet, N. A. Katcho.
TÍTULO: **Interface potential and film thick dependent surface tension of adsorbed liquid films.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *87th Symposium on Colloids and Interface Science (ACS)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Riverside, California, Estados Unidos.
AÑO: 2013
18. AUTORES: J. M. G. Palanco, L. G. MacDowell, J. Benet y V. H. Elvira
TÍTULO: **Structure and Thermodynamics of Curved Interfaces.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *18th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.
AÑO: 2012

19. AUTORES: L. G. MacDowell
TÍTULO: **Computer simulation of interface potentials: towards a first principle description of complex interfaces.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Seminario por invitación.
CONGRESO: *Hybrid modelling of flows of complex fluids*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Göttingen, Alemania.
AÑO: 2011
20. AUTORES: L. G. MacDowell
TÍTULO: **Role of Long Range Forces at Interfaces**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Seminario por invitación.
CONGRESO: *Bifurcations and instabilities in interfacial complex fluid flows*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Lorenzo del Escorial, Madrid, España.
AÑO: 2010
21. AUTORES: L. G. MacDowell, F. J. Blas and P. Bryk.
TÍTULO: **The Role of Long Range Forces on Surface Free Energies.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *17th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.
AÑO: 2009
22. AUTORES: L. G. MacDowell y C. Vega.
TÍTULO: **The Dielectric Constant of Ice.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *17th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.
AÑO: 2009
23. AUTORES: L. G. MacDowell, R. de Gregorio y F. J. Blas.
TÍTULO: **Sobre el papel de las fuerzas de largo alcance en las interfases.**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *Congreso de Física Estadística, FisEs-09 (RSEF)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Huelva, España.
AÑO: 2009
24. AUTORES: L. G. MacDowell y M. Müller
TÍTULO: **The role of Long Range Forces: First and Second Order Wetting on a brush**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *16th Symposium on Thermophysical Properties (NIST)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boulder, Estados Unidos.
AÑO: 2006

25. AUTORES: L. G. MacDowell, V. K. Shen y J. R. Errington
TÍTULO: **Condensation and Cavitation of spherical, cylindrical and slab like droplets and bubbles**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *7th Liblice Conference*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lednice, Republica Checa.
AÑO: 2006
26. AUTORES: L. G. MacDowell y M. Müller
TÍTULO: **The role of Long Range Forces: First and Second Order Wetting on a brush**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *6th Liquid Matter Conference (EPS)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Utrecht, Holanda.
AÑO: 2005
27. AUTORES: L. G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau y K. Binder
TÍTULO: **La nucleación en sistemas confinados o el intrigante lazo de Van der Waals**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *Primer Simposio de Investigadores Jóvenes, RSEQ*
PUBLICACIÓN: *El intrigante lazo de Van der Waals*, ed. Nazario Martín, (en prensa)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.
AÑO: 2004
28. AUTORES: L. G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau and K. Binder
TÍTULO: **The condensation/evaporation transition of liquid droplets**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia Invitada (IUPAP)
CONGRESO: *Disorder, Complexity and Biology 2004*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benarés, India.
AÑO: 2004
29. AUTORES: L. G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau and K. Binder
TÍTULO: **Computer Simulation Study of a First Order Phase Transition: The Condensation of a Droplet**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *Thermodynamics 2003*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cambridge, Reino Unido.
AÑO: 2003
30. AUTORES: L. G. MacDowell, C. McBride, C. Menduiña, E. Sanz y C. Vega
TÍTULO: **Simulación por Ordenador de Fluidos Moleculares**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *Reunión de Expertos en Tecnologías de Fluidos Comprimidos 2003 (FLUCOMP)*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.
AÑO: 2003

31. AUTORES: L. G. MacDowell, P. Virnau, M. Mueller, K. Binder.
TÍTULO: **Polymer-solvent mixtures: a quantitative comparison between TPTP1 and computer simulations**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *15 Years of the SAFT Equation*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, España.
AÑO: 2003
32. AUTORES: L. G. MacDowell, M. Müller and K. Binder
TÍTULO: **Wetting of Polymeric Liquids: Monte Carlo Simulations and Self Consistent Field Theory**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *TRI-Princeton 2001*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Princeton, Estados Unidos.
AÑO: 2001
33. AUTORES: L. G. MacDowell, M. Müller, P. Virnau, C. Vega and K. Binder
TÍTULO: **Critical Behaviour of Chain Molecules and their Mixtures and Prediction of the Critical Point of Polyethylene**
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia
CONGRESO: *Thermodynamics 2001*
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bristol, Inglaterra.
AÑO: 2001

2.3 DIRECCIÓN Y PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS COMPETITIVOS DE INVESTIGACIÓN

DIRECCIÓN DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2017-89361-C3-2-P: Redes de Enlaces en Coloides, Disoluciones Acuosas e Interfases*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad.

DURACIÓN DESDE: Enero 2018 HASTA: Diciembre 2020.

INVESTIGADORES PRINCIPALES: Eva G. Noya y Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2010-22047-C05-05: Modelización Jerárquica de la Interfase en Sistemas Confinados*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.

DURACIÓN DESDE: Enero 2011 HASTA: Diciembre 2013 (prorrogado hasta Septiembre 2014).

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

TÍTULO DEL PROYECTO: *CCG08-UCM/ESP-4358: Simulación molecular de interfases: Estructura, adsorción y tensiones superficiales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad Autónoma de Madrid/Universidad Complutense de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Enero 2009 HASTA: Diciembre 2009.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 2

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

TÍTULO DEL PROYECTO: *PR34/07-15906 : Simulación molecular de las interfases de hidrocarburos e hidrocarburos-agua. Estructura, adsorción y tensiones superficiales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid-Banco de Santander.

DURACIÓN DESDE: Enero 2008 HASTA: Diciembre 2009.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Principal.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Transiciones de Fase de Fluidos Homogéneos e Inhomogéneos: Estudio Teórico, Simulación por Ordenador y Aplicación a Polímeros*

ENTIDAD FINANCIADORA: MCYT

DURACIÓN DESDE: 1 de Junio de 2002 HASTA: 1 de Junio de 2003.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis González MacDowell

NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: uno

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Ramón y Cajal

DIRECCIÓN DE PROYECTOS EN GRANDES ORDENADORES

TÍTULO DEL PROYECTO: *FI-2019-3-0014 Van der Waals Forces at the Ice Surface*

ENTIDAD FINANCIADORA: Red Española de Supercomputación (RES)

DURACIÓN DESDE: Septiembre 2019 HASTA: Febrero 2020.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *QCM-2019-1-0038 Computer aided design of chiral gold nanocrystals for plasmonic applications.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Red Española de Supercomputación (RES)

DURACIÓN DESDE: Marzo 2019 HASTA: Junio 2019.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *QCM-2018-3-0039 Computer aided design of chiral gold nanocrystals for plasmonic applications.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Red Española de Supercomputación (RES)

DURACIÓN DESDE: Noviembre 2018 HASTA: Febrero 2019.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 3.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *QCM-2017-3-0034: Premelting and Roughening Phase Transitions on the Surface of Ice*

ENTIDAD FINANCIADORA: Red Española de Supercomputación (RES)

DURACIÓN DESDE: Noviembre 2017 HASTA: Febrero 2017.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 2.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *QCM-2017-2-0008: Premelting and Roughening Phase Transitions on the Surface of Ice*

ENTIDAD FINANCIADORA: Red Española de Supercomputación (RES)

DURACIÓN DESDE: Julio 2017 HASTA: Octubre 2017.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 2.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

TÍTULO DEL PROYECTO: *2010PA3424: Structure and Phase Transitions on the Surface of Ice*

ENTIDAD FINANCIADORA: Partner for Advance Computing in Europe (PRACE)

DURACIÓN DESDE: Noviembre 2016 HASTA: Diciembre 2016.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Luis G. MacDowell

NUMERO DE INVESTIGADORES: 2.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: IP.

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO DEL PROYECTO: *PIP2020-115722GB-C21* Agregación y Orden Emergente en Materia Blanda y Biológica.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.
DURACIÓN DESDE: Septiembre 2021 HASTA: Septiembre 2023.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Eva González Noya.
NUMERO DE INVESTIGADORES: 3.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

TÍTULO DEL PROYECTO: *MAT-2014-59678-R* Supercristales de Nanopartículas Metálicas para el Desarrollo de Sensores Plasmónicos Supramoleculares.

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación.
DURACIÓN DESDE: Enero 2015 HASTA: Septiembre 2017.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Andrés Guerrero Martínez
NUMERO DE INVESTIGADORES: 6.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

TÍTULO DEL PROYECTO: (*S2009/ESP-1691*): *Modelización y Simulación de Sistemas Complejos (MODELICO)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Conserjería de Educación de la Comunidad de Madrid.
DURACIÓN DESDE: Enero 2010 HASTA: Diciembre 2014.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Enrique Lomba (Coordinador).
NOTA: Proyecto coordinado con grupos de instituciones públicas de investigación madrileñas (UCM, UAM, UCIII, UNED y CSIC)
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2007-66079-C02-01*: *Simulación por Ordenador del Equilibrio de las Fases del Agua.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia
DURACIÓN DESDE: Enero 2008 HASTA: Diciembre 2010
INVESTIGADOR PRINCIPAL: C. Vega.
NUMERO DE INVESTIGADORES: 6
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: *S-0505/ESP/000299* : *Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos en Materia Condensada (MOSSNOHO)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Conserjería de Educación de la Comunidad de Madrid.
DURACIÓN DESDE: Enero 2006 HASTA: Diciembre 2009
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Guillermo Navascués (coordinador)
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador
NOTA: Proyecto coordinado con 7 grupos de 5 instituciones públicas (UCM, UAM, UCIII, UNED y CSIC)

TÍTULO DEL PROYECTO: *FP6-509249* : *THEORY AND COMPUTER SIMULATION OF INHOMOGENEOUS FLUIDS.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Union Europea. Sixth Framework Program.
DURACIÓN DESDE: Marzo 2004 HASTA: Marzo 2007

INVESTIGADOR PRINCIPAL: A. Patrykiewicz (coordinador)
NUMERO DE INVESTIGADORES: 6 laboratorios Europeos
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2004-06227-C02-02: Teoría y simulación del equilibrio de fases de sistemas de interés tecnológico, industrial y biológico*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia
DURACIÓN DESDE: Enero 2005 HASTA: Diciembre 2007.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: C. Vega.
NUMERO DE INVESTIGADORES: 4
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: *BFM2001-1420-C02-01 Mecánica Estadística de Sistemas Complejos. Moléculas Flexibles y Mesofases*

ENTIDAD FINANCIADORA: MCYT
DURACIÓN DESDE: 1 de Enero de 2002 HASTA: 12 de Diciembre de 2004.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Ramón y Cajal

TÍTULO DEL PROYECTO: *Wetting and Structure Formation at Interfaces*

ENTIDAD FINANCIADORA: Deutsche Forschung Gemeinschaft, DFG, (agencia nacional alemana de financiación científica).
DURACIÓN DESDE: Junio de 2000 HASTA: Mayo de 2002
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder y Marcus Müller.
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: tres
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Postdoctoral

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB97-0329 TEORÍA Y SIMULACIÓN DE TRANSICIONES DE FASES EN SISTEMAS COMPLEJOS: HIDROCARBUROS Y CRISTALES LÍQUIDOS*

ENTIDAD FINANCIADORA: CICYT
DURACIÓN DESDE: Noviembre 1998 HASTA: Diciembre de 2001
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: dos
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Becario predoctoral

TÍTULO DEL PROYECTO: *PB94-0285 ESTUDIO TEORICO Y DE SIMULACION DE LÍQUIDOS MOLECULARMENTE COMPLEJOS CON POSIBLES APLICACIONES EN DIFERENTES CAMPOS CIENTÍFICOS E INDUSTRIALES*

ENTIDAD FINANCIADORA: CICYT
DURACIÓN DESDE: Junio de 1996 HASTA: Octubre 1998
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Vega de las Heras
NÚMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: cuatro
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Becario predoctoral

DIRECCIÓN DE GRUPOS DE INVESTIGACIÓN

NOMBRE DEL GRUPO: 921628 - *QUÍMICA SUPRAMOLECULAR: HIDRATACIÓN Y NANOENCAPSULACIÓN DE MOLÉCULAS ANFIFILÍCAS*

ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Septiembre de 2017 HASTA: Diciembre de 2021.

DIRECCIÓN: Andrés Guerrero.

PARTICIPACIÓN: Co-IP.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 5 Investigadores.

PARTICIPACIÓN EN GRUPOS DE INVESTIGACIÓN

NOMBRE DEL GRUPO: 910570 - *SIMULACIÓN POR ORDENADOR Y MODELADO MECANOESTADÍSTICO DE LÍQUIDOS Y SÓLIDOS*

ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Diciembre de 2004 HASTA: Septiembre de 2017.

DIRECCIÓN: Carlos Vega de las Heras.

PARTICIPACIÓN: Investigador.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 4 Investigadores.

NOMBRE DEL GRUPO: 921628 - *QUÍMICA SUPRAMOLECULAR: HIDRATACIÓN Y NANOENCAPSULACIÓN DE MOLÉCULAS ANFIFILÍCAS*

ENTIDAD FINANCIADORA: Universidad Complutense de Madrid.

DURACIÓN DESDE: Enero de 2021 HASTA: Hasta la fecha.

DIRECCIÓN: Andrés Guerrero.

PARTICIPACIÓN: Investigador..

NUMERO DE INVESTIGADORES: 5 Investigadores.

2.4. DIRECCIÓN Y PARTICIPACIÓN EN OTROS PROYECTOS Y CONTRATOS DE INVESTIGACIÓN

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE TRANSFERENCIA A LA INDUSTRIA

TÍTULO DEL CONTRATO: : *Development of a New Equation of State for Polymer–Solvent Systems and its validation through Monte Carlo Simulations*

ENTIDAD FINANCIADORA: BASF

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad Johannes Gutenberg de Mainz.

DURACIÓN DESDE: Noviembre de 2006 HASTA: Octubre de 2008

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador colaborador.

TÍTULO DEL CONTRATO: *Solubility of Small Molecules in Polymer Matrixes: A Computer Simulation Study*

ENTIDAD FINANCIADORA: BASF

ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad Johannes Gutenberg de Mainz, Universidad de Heidelberg, Universidad de Colonia.

DURACIÓN DESDE: Junio de 2000 HASTA: Mayo de 2002

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Kurt Binder y Marcus Müller.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador Postdoctoral, tiempo parcial.

PARTICIPACIÓN EN REDES DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO DEL PROYECTO: *RED2018-102593-T: Red de Simulación Molecular*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

DURACIÓN DESDE: Enero 2020 HASTA: Diciembre 2021.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Felipe J. Blas.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 10 Equipos de investigación de Universidades Españolas.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2015-71749-RED: Red de Simulación Molecular*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación (Acción Integrada).

DURACIÓN DESDE: Enero 2016 HASTA: Noviembre 2018.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Felipe Jiménez Blas.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 10 grupos.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

TÍTULO DEL PROYECTO: *FIS2011-13119-E: Red de Simulación Molecular*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación (Acción Integrada).

DURACIÓN DESDE: Enero 2012 HASTA: Diciembre 2012.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Felipe Jiménez Blas.

NUMERO DE INVESTIGADORES: 10 grupos.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Investigador.

2.5 DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES

TÍTULO: Estructura Molecular y Hábitos Cristalinos en Interfases Sólidas Complejas: Un Estudio por Simulación Molecular.

DOCTORANDO: Pablo Llombart González

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense

FACULTAD/ESCUELA: CC. Químicas

AÑO: 2019

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: Estudio por Simulación de Fluctuaciones Capilares: Interfases Fluidas, Adsorbidas y Sólidas (co-dirigida con Eduardo Sanz).

DOCTORANDO: Jorge Benet Villanueva

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense

FACULTAD/ESCUELA: CC. Químicas

AÑO: 2015

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: Termodinámica Estadística de Fluidos Moleculares y sus Interfases.

DOCTORANDO: José María García Palanco

UNIVERSIDAD: Universidad Complutense

FACULTAD/ESCUELA: CC. Químicas

AÑO: 2013

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

2.7 ESTANCIAS EN CENTROS DE INVESTIGACIÓN

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

CENTRO: Dpto. de Física Aplicada, Universidad del Bio-Bio.
LOCALIDAD: Concepción PAÍS: Chile AÑO: 2019 DURACIÓN: 15 días
TEMA: Nucleación de metales CLAVE: I

CENTRO: Dpto. de Matemáticas Aplicadas, Loughborough University.
LOCALIDAD: Loughborough PAÍS: Reino Unido AÑO: 2017-2018 DURACIÓN: 6 meses
TEMA: Dinámica de interfaces CLAVE: I

CENTRO: Dpto. de Modelización de procesos Físico-Químicos, Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.
LOCALIDAD: Lublin PAÍS: Polonia AÑO: 2007 DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Interfaces de polímeros CLAVE: I

CENTRO: Dpto. de Modelización de procesos Físico-Químicos, Universidad Maria Curie-Sklodowska, Lublin, Polonia.
LOCALIDAD: Lublin PAÍS: Polonia AÑO: 2005 DURACIÓN: 2 meses
TEMA: Interfaces de polímeros CLAVE: I

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg
LOCALIDAD: Mainz PAÍS: Alemania AÑO: 2000-2001-2002 DURACIÓN: 2 años
TEMA: Wetting y propiedades interfaciales de polímeros CLAVE: P

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Johannes Gutenberg
LOCALIDAD: Mainz PAÍS: Alemania AÑO: 1998 DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Ecuación de estado y simulación de polímeros CLAVE: D

CENTRO: Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad Libre de Bruselas (U.L.B)
LOCALIDAD: Bruselas PAÍS: Bélgica AÑO: 1995-1996 DURACIÓN: 6 meses
TEMA: Dinámica Molecular de Moléculas Flexibles CLAVE: D

2.8 COLABORACIONES INTERNACIONALES

Buena parte de mis trabajos se han realizado en el contexto de colaboraciones internacionales, desde mi primera estancia predoctoral con J. P. Ryckaert en la Universidad Libre de Bruselas. Continúan con otra etapa predoctoral en una colaboración con Marcus Müller y Kurt Binder que prosigue durante casi una década. Desde entonces, las oportunidades de colaboración surgen continuamente de modo espontáneo.

Colaborador	Institución	País	Participación	Referencia
W. Rzyško	U. Maria Curie-Sklodowska	Polonia	IP	1
R. Rozas	U. del Bio-Bio	Chile	IP	5
A. Archer	U. de Loughborough	Reino Unido	IP	6,9
M. Bostrom	Norwegian U. of Sci. and Tech.	Noruega	IP	8
S. Kalliadasis	Imperial College	Reino Unido	IP	18
P. Bryk	U. Maria Curie-Sklodowska	Polonia	IP	36, 49, 52
G. Jackson	Imperial College	Reino Unido	IP	48
J. Errington	U. New York-Buffalo	Estados Unidos	IP	55
K. Binder	U. Johannes-Gutenberg	Alemania	IP	45-47,50
			PreDoc, PostDoc	56,61,63, 66
			PreDoc, PostDoc	75-76,79,89
M. Müller	U. Johannes-Gutenberg	Alemania	PreDoc, PostDoc	59, 70, 72, 80-82, 90
J.P. Ryckaert	U. Libre de Bruxelles	Bélgica	PreDoc	73

COLABORACIONES NACIONALES

Con frecuencia las colaboraciones nacionales son tan fructíferas como las internacionales.

Colaborador	Institución	Participación	Referencia
E. G. Noya	CSIC-Rocasolano	IP	6,9,10,12,15,16
A. Guerrero	U. Complutense	IP	11, 14, 17, 20
P. Tarazona	U. Autónoma	IP	23
F.J. Blas	U. Huelva	IP	21, 31, 33-35, 44, 48, 67

2.9 OTROS MÉRITOS RELACIONADOS CON LA ACTIVIDAD INVESTIGADORA

EVALUACIONES Y ACREDITACIONES

- **Acreditación ANECA** para **Profesor Contratado Doctor**, área de Ciencias Experimentales, año 2003.
 - **Evaluación positiva I3** de la actividad investigadora por parte de la ANEP, año 2006.
 - **Habilitación Nacional** por el Área de Química Física, Febrero 2007.
 - **Acreditación Nacional** por el Área de Química, Julio de 2021.
-

SEXENIOS DE INVESTIGACIÓN

- **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 1996–2001**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2002–2007**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2008–2013**, CNEAI.
 - **Evaluación positiva de la actividad investigadora, tramo 2014–2019**, CNEAI.
-

REVISIÓN DE ARTÍCULOS

- Revisor habitual: The Journal of Chemical Physics, Physical Review Letters, Physical Review E, Physical Chemistry Chemical Physics.
- Revisor ocasional: Langmuir, Journal of Colloid and Interface Science, Macromolecules, Colloids and Surfaces A, Journal of Physical Chemistry Letters.
- Revisiones también en: Accounts of Chemical Research, The Journal of Physical Chemistry Letters, Journal of the American Chemical Society, Nature Communications, Soft Matter, Langmuir, Journal of Statistical Physics, Polymer, International Journal of Thermophysics, Industrial & Engineering Chemical Research, Molecular Physics, European Journal of Physics-E, Chemical Physics, Journal of Computational Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts, Journal of Molecular Structure, Physics of Fluids, Fluid Phase Equilibria, Journal of Physics: Condensed Matter, Journal of Colloids and Interface Science.

REVISOR DE PROYECTOS

- Evaluador de la “Agence Nationale de la Recherche (ANR)”, convocatoria ‘Blanc’ de proyectos 2009.
- Evaluador de la Agencia Nacional de Evaluación (ANEP), convocatoria 2009.
- Evaluador de la “Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT)” 2014.
- Evaluador de la “Czech Science Foundation” (2014).
- Evaluador de la Agencia Nacional de Evaluación (ANEP), convocatoria 2021.

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

- ‘A la caza de los cristalitos de nieve’, Semana de la Ciencia 2016.
- ‘A la caza de los cristalitos de nieve’, Semana de la Ciencia Indignada 2017.

CURSOS DE FORMACIÓN

- “Observation and Prediction of Phase Transitions in Complex Fluids”, CXXXIX curso NATO-ASI, realizado en Varenna, Italia, del 26 de Julio al 5 de Agosto de 1994.
- “Ecole Thematique de la Diffusion Neutronique”, curso realizado en Amblateuse, Francia, en Mayo de 1996.

3. EXPERIENCIA EN GESTIÓN ACADÉMICA Y CIENTÍFICA

3.1 DESEMPEÑO DE CARGOS DE RESPONSABILIDAD

- Miembro electo del Claustro Universitario por el sector de Investigadores Contratados, desde Mayo de 2006 hasta Mayo de 2009.

3.2. DESEMPEÑO DE PUESTOS EN EL ENTORNO EDUCATIVO

- Miembro de la Comisión Académica del programa de doctorado "Química Teórica y Modelización Computacional" desde 2017.
- Miembro de la Comisión Académica y Coordinador del Módulo de Técnicas de Simulación del Máster en Simulación Molecular, desde 2018 hasta la fecha.

3.4 OTROS MERITOS RELACIONADOS CON LA EXPERIENCIA EN GESTIÓN

- Miembro del comité organizador local del congreso FisEs05, Madrid, 2005.
- Secretario del comité organizador 'Workshop on Inhomogeneous Fluids', Universidad Complutense de Madrid, 2007.
- Miembro del comité organizador local del congreso Thermodynamics 2019, Organizado por la Royal Society, Huelva, España.