

c v n CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO



Sofía Calero Díaz

Fecha del documento: 30/04/2012

v 1.3.0

9f269a919ea0834aea5ef2af5fd5ada9

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>

**Sofía Calero Díaz**

Apellidos: **Calero Díaz**
 Nombre: **Sofía**
 DNI: **07233043A**
 Fecha de nacimiento: **19/07/1970**
 Sexo: **Mujer**
 Nacionalidad: **España**
 Ciudad de nacimiento: **Madrid**
 Teléfono fijo: **(+34) 954977594**
 Correo electrónico: **scalero@upo.es**
 Teléfono móvil: **(+34) 619207369**
 Página web personal: **http://www.upo.es/raspa**

Situación profesional actual

Nombre de la entidad: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Categoría/puesto o cargo: Directora de la Oficina de Proyectos Europeos

Fecha de inicio: 01/07/2011

Modalidad del contrato: Gestión (cargo asimilado equiparado a Decano)

Nombre de la entidad: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Departamento, servicio, etc.: Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Facultad de Ciencias Experimentales

Categoría/puesto o cargo: Profesor Titular de Universidad **Docente (Sí/No):** Si

Fecha de inicio: 19/11/2009

Modalidad del contrato: Funcionario/a **Tipo de dedicación:** Tiempo completo

Primaria (Cód. Unesco): 230000 - Química

Secundaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física

Palabras clave dedicación: Química física de materiales; Termodinámica; Materiales

Tipo de actividad de gestión: Universitaria

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Nombre de la entidad	Categoría/puesto o cargo	Fecha de inicio
1	Universidad Pablo de Olavide, Sevilla	Profesor Contratado Doctor	01/09/2006
2	Universidad Pablo de Olavide, Sevilla	Contratado Ramón y Cajal	01/12/2003
3	Universidad de Amsterdam (Holanda)	Investigador Postdoctoral (Marie Curie Fellow)	01/12/2001
4	Universidad de Amsterdam (Holanda)	Investigador Postdoctoral (Contratado)	01/12/2000
5	Universidad Complutense de Madrid	Investigador Predoctoral (FPI)	01/09/1996



- 1** **Nombre de la entidad:** Universidad Pablo de Olavide, Sevilla
Categoría/puesto o cargo: Profesor Contratado Doctor
Fecha de inicio: 01/09/2006
Fecha de finalización: 09/11/2009
- 2** **Nombre de la entidad:** Universidad Pablo de Olavide, Sevilla
Categoría/puesto o cargo: Contratado Ramón y Cajal
Fecha de inicio: 01/12/2003
Fecha de finalización: 31/08/2006
- 3** **Nombre de la entidad:** Universidad de Amsterdam (Holanda)
Categoría/puesto o cargo: Investigador Postdoctoral (Marie Curie Fellow)
Fecha de inicio: 01/12/2001
Fecha de finalización: 30/11/2003
- 4** **Nombre de la entidad:** Universidad de Amsterdam (Holanda)
Categoría/puesto o cargo: Investigador Postdoctoral (Contratado)
Fecha de inicio: 01/12/2000
Fecha de finalización: 30/11/2001
- 5** **Nombre de la entidad:** Universidad Complutense de Madrid
Categoría/puesto o cargo: Investigador Predoctoral (FPI)
Fecha de inicio: 01/09/1996
Fecha de finalización: 20/10/2000



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Diplomaturas, licenciaturas e ingenierías, grados y másteres

Titulación oficial: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas Especialidad Química Fundamental Opción Química Física

Entidad que expide el título: Universidad Complutense de Madrid.

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 30/06/1995

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias Químicas (y Premio Extraordinario)

Universidad que titula: Universidad Complutense de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de la titulación: 20/10/2000

Otra formación universitaria de posgrado

1 Tipo de la formación: Especialidad

Titulación de posgrado: Especialista Universitario en Innovación Docente en el Espacio Europeo de Educación Superior

Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 06/02/2012

Calificación: Sobresaliente

2 Titulación de posgrado: Certificado de Aptitud Pedagógica

Universidad que titula: Universidad Complutense de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 02/1996

3 Titulación de posgrado: Grado de Sobresaliente en Ciencias Químicas

Universidad que titula: Universidad Complutense de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Químicas

Fecha de titulación: 14/12/1995



Cursos y seminarios recibidos de perfeccionamiento, innovación y mejora docente, nuevas tecnologías, etc., cuyo objetivo sea la mejora de la docencia

- 1** **Título del curso/seminario:** Taller de coordinación docente
Objetivo del curso/seminario: Coordinar el Grado de Biología
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
Fecha de inicio: 15/11/2011
Fecha de fin: 16/11/2012 , 2 horas
- 2** **Título del curso/seminario:** El trabajo didáctico por competencias
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2009
Fecha de fin: 2010, 40 horas
- 3** **Título del curso/seminario:** Adaptación de asignaturas al Espacio Europeo de Educación Superior
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2009
Fecha de fin: 2010, 40 horas
- 4** **Título del curso/seminario:** El Portafolio como recurso didáctico y estrategia evaluativa
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2008
Fecha de fin: 2009, 40 horas
- 5** **Título del curso/seminario:** La Acción Tutorial: Otra forma de enseñar en la Universidad
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2008
Fecha de fin: 2009, 40 horas
- 6** **Título del curso/seminario:** La elaboración de la Guía Docente en el marco del proceso de convergencia hacia el Espacio Europeo de Educación Superior (EEES)
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2007
Fecha de fin: 2008, 40 horas
- 7** **Título del curso/seminario:** Curso de formación de profesorado e innovación docente: Docencia virtual con WebCT
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2004
Fecha de fin: 2005, 140 horas



Conocimiento de idiomas

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	Bien	Bien	Bien
Español	Bien	Bien	Bien

Actividad docente

Docencia impartida

- Nombre asignatura/curso:** Química General/ Primer curso
Titulación: Grado en Biotecnología
Fecha inicio: 2010 **Fecha fin:** 2012
Fecha de última vez: 2012
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
- Nombre asignatura/curso:** Química Ambiental Avanzada
Titulación: Máster en Biotecnología Ambiental, Industrial y Alimentaria
Fecha inicio: 2010 **Fecha fin:** 2012
Fecha de última vez: 2012
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide
- Nombre asignatura/curso:** Bases Matemáticas, Físicas, Químicas y Biológicas
Titulación: Máster Interuniversitario en Coloides e Interfases
Fecha inicio: 2009 **Fecha fin:** 2012
Fecha de última vez: 2012
Entidad de realización: Máster Interuniversitario
- Nombre asignatura/curso:** Termodinámica y Cinética Química/ Segundo
Titulación: Grado en Biotecnología
Fecha inicio: 2009 **Fecha fin:** 2011
Fecha de última vez: 2012
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
- Nombre asignatura/curso:** Modelización de Biomoléculas/ Tercero y Cuarto cursos
Titulación: Licenciado en Biotecnología
Fecha inicio: 2008 **Fecha fin:** 2011
Fecha de última vez: 2011
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
- Nombre asignatura/curso:** Termodinámica y Cinética Química/ Segundo
Titulación: Licenciado en Biotecnología
Fecha inicio: 2005 **Fecha fin:** 2011



Fecha de última vez: 2011

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales

7 Nombre asignatura/curso: Contaminación Atmosférica/Cuarto curso

Titulación: Licenciado en Ciencias Ambientales

Fecha inicio: 2003

Fecha fin: 2011

Fecha de última vez: 2011

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales

8 Nombre asignatura/curso: Química Orgánica/ Primer curso

Titulación: Grado en Biotecnología

Fecha inicio: 2009

Fecha fin: 2010

Fecha de última vez: 2010

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales

9 Nombre asignatura/curso: Físicoquímica de Biomoléculas/ Segundo curso

Titulación: Licenciado en Biotecnología

Fecha inicio: 2009

Fecha fin: 2010

Fecha de última vez: 2010

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales

10 Nombre asignatura/curso: Biocomputación

Titulación: Doctorado en Biotecnología

Fecha inicio: 2003

Fecha fin: 2010

Fecha de última vez: 2010

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

11 Nombre asignatura/curso: Fundamentos de Química/ Primer curso

Titulación: Licenciado en Biotecnología

Fecha inicio: 2004

Fecha fin: 2009

Fecha de última vez: 2009

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales

12 Nombre asignatura/curso: Área superficial y porosidad

Titulación: Curso de especialización de postgrado, CSIC

Fecha inicio: 04/04/2008

Fecha fin: 08/04/2008

Fecha de última vez: 04/04/2008

Entidad de realización: Universidad de Oviedo

Tipo de entidad: Universidad

13 Nombre asignatura/curso: Teoría y Simulación de Coloides

Titulación: Doctorado en Coloides e Interfases

Fecha inicio: 2006

Fecha fin: 2008

Fecha de última vez: 2008

Entidad de realización: Doctorado interuniversitario

Tipo de entidad: Universidad



- 14 Nombre asignatura/curso:** Química de Proteínas
Titulación: Doctorado en Biotecnología
Fecha inicio: 2004 **Fecha fin:** 2008
Fecha de última vez: 2008
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide
- 15 Nombre asignatura/curso:** Bases Físicas y Químicas del Medio Ambiente/Primer curso
Titulación: Licenciado en Ciencias Ambientales
Fecha inicio: 2003 **Fecha fin:** 2008
Fecha de última vez: 2008
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
- 16 Nombre asignatura/curso:** Understanding Molecular Simulation
Titulación: Curso de postgrado
Fecha inicio: 10/2005 **Fecha fin:** 10/2005
Fecha de última vez: 10/2005
Entidad de realización: Universidad de Amsterdam **Tipo de entidad:** Universidad
- 17 Nombre asignatura/curso:** Advanced Monte Carlo Methods
Titulación: Curso de Postgrado
Fecha inicio: 17/01/2005 **Fecha fin:** 28/01/2005
Fecha de última vez: 01/2005
Entidad de realización: CECAM **Tipo de entidad:** CECAM, Lyon
- 18 Nombre asignatura/curso:** Técnicas Avanzadas en Química/Cuarto curso
Titulación: Licenciado en Ciencias Ambientales
Fecha inicio: 2003 **Fecha fin:** 2005
Fecha de última vez: 2005
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Experimentales
- 19 Nombre asignatura/curso:** Molecular Simulation
Titulación: Curso de postgrado
Fecha inicio: 2001 **Fecha fin:** 2004
Fecha de última vez: 2004
Entidad de realización: Universidad de Amsterdam **Tipo de entidad:** Universidad

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** Simulación molecular del procesos de adsorción y difusión en zeolitas con cationes
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Doctorando-a/alumno-a: Almudena García Sánchez
Calificación: Sobresaliente Cum Laude
Fecha de lectura: 13/02/2012
Doctorado Europeo: Si **Fecha de mención:** 13/02/2012



- 2** **Título del trabajo:** Suitability of Metal Organic Frameworks for Chiral Separations
Tipo de proyecto : Proyecto Fin de máster
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Doctorando-a/alumno-a: Rocío Bueno Pérez
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 02/07/2011
- 3** **Título del trabajo:** Separación de Sulfuro de Hidrógeno de una mezcla de biogás
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Estefanía Caballero Ribero
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 06/2011
- 4** **Título del trabajo:** Separación en Cu-BTC de agua y sulfuro de hidrógeno
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Luz García-Montalbán Sáenz
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 06/2011
- 5** **Título del trabajo:** Transport and accessibility in zeolites and metal organic frameworks
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Doctorando-a/alumno-a: Elena García Pérez
Calificación: Sobresaliente Cum Laude y Premio Extraordinario de Doctorado
Fecha de lectura: 02/07/2010
Doctorado Europeo: Si **Fecha de mención:** 02/07/2010
- 6** **Título del trabajo:** On the performance of Cu-BTC Metal Organic Framework for carbon tetrachloride gas removal: A molecular simulation study
Tipo de proyecto : Trabajo conducente a obtención de DEA
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Ana Martín Calvo
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 30/06/2010
- 7** **Título del trabajo:** Molecular simulations in microporous materials: adsorption and separation
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad Tecnológica de Delft **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad: Delft, Holanda
Doctorando-a/alumno-a: Juan Manuel Castillo Sánchez
Fecha de lectura: 07/06/2010
- 8** **Título del trabajo:** Molecular Simulations of Water in Porous Materials
Tipo de proyecto : Trabajo conducente a obtención de DEA
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Juan Manuel Castillo Sanchez
Calificación: Sobresaliente por unanimidad
Fecha de lectura: 28/05/2009



- 9** **Título del trabajo:** Studying ITQ-12 Efficiency in Propane-Propylene Separation using Advanced Simulation Methods
Tipo de proyecto : Trabajo conducente a obtención de DEA
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Juan José Gutiérrez Sevillano
Calificación: Sobresaliente por unanimidad
Fecha de lectura: 28/05/2009
- 10** **Título del trabajo:** Desarrollo de un método computacional para predecir la localización del aluminio en aluminosilicatos
Tipo de proyecto : Trabajo conducente a obtención de DEA
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Elena García Pérez
Calificación: Sobresaliente por unanimidad
Fecha de lectura: 10/07/2008
- 11** **Título del trabajo:** Estudio computacional de la adsorción y difusión de hidrocarburos en estructuras Linde Type A
Tipo de proyecto : Trabajo conducente a obtención de DEA
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Almudena García Sánchez
Calificación: Sobresaliente por unanimidad
Fecha de lectura: 10/07/2008
- 12** **Título del trabajo:** Simulación molecular de adsorción y separación de gas natural en estructuras metalorgánicas
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Ana Martín Calvo
Calificación: Matrícula de Honor
Fecha de lectura: 06/2007
- 13** **Título del trabajo:** Simulación molecular del equilibrio líquido vapour de moléculas Kihara lineales. Influencia de la elongación sobre las propiedades críticas
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Marta Basoalto Palmero
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 06/2004
- 14** **Título del trabajo:** Análisis de la influencia de cationes sodio sobre la adsorción de alcanos en zeolitas mordernita
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide
Doctorando-a/alumno-a: Isabel María Torrens Izquierdo
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 06/2004
- 15** **Título del trabajo:** Simulación molecular de la adsorción de n-alcanos en zeolitas Na-MFI. Desarrollo de ecuaciones empíricass mordernita
Tipo de proyecto : Proyecto Final de Carrera
Universidad que titula: Universidad Pablo de Olavide



Doctorando-a/alumno-a: Elena García Pérez
Calificación: Matrícula de Honor
Fecha de lectura: 06/2004

Participación en proyectos de innovación docente

- Título del proyecto:** Coordinación en la actividad docente para los títulos de Grado y de dobles títulos de Grado
Tipo de participación: Colaborador
Tipo de duración: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2011
Fecha fin de la participación: 2012, 1 año
- Título del proyecto:** Proyectos destinados a articular la coordinación en la actividad docente para los títulos de Grado y de dobles títulos de Grado
Tipo de participación: Colaborador
Tipo de duración: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2009
Fecha fin de la participación: 2010, 1 año
- Título del proyecto:** El correo electrónico como herramienta de apoyo en tutorías
Tipo de participación: Colaborador
Tipo de duración: Por tiempo determinado
Entidad financiadora: Unidad para la Calidad de las Universidades Andaluzas **Tipo de entidad:** UCUA
Fecha de inicio: 2004
Fecha fin de la participación: 2005, 1 año

Participación en congresos con ponencias orientadas a la formación docente

Denominación del evento: III Jornadas de Innovación Docente en la Universidad Pablo de Olavide
Tipo de evento: Jornada
Fecha de la presentación: 19/04/2012
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide
Fecha de inicio: 19/04/2012 **Fecha de finalización:** 20/04/2012
Número de horas: 15 horas
MoleQla: un proyecto de innovación docente universitaria en el Espacio Europeo de Educación Superior.

Premios de innovación docente recibidos

Denominación: Mención de Excelencia Docente
Entidad que concede: Universidad Pablo de Olavide
A propuesta de: Universidad Pablo de Olavide
Fecha de concesión: 20/03/2012



Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- 1 Descripción de la actividad:** Creación de la revista MoleQla (<http://www.upo.es/moleqla>)
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide
- 2 Descripción de la actividad:** Responsable de Calidad del Máster Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases desde el 28 de abril de 2008 hasta el momento actual
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide

Aportaciones más relevantes de su CV de docencia

- 1 Descripción:** DOCENTIA-A-UPO evaluación favorable (recibe calificación de excelente)
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de fin de la actividad: 20/03/2012
- 2 Descripción:** Reconocimiento por méritos docentes (un quinquenio)
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de fin de la actividad: 30/11/2008
- 3 Descripción:** Certificado de Calidad Docente (recibe calificación de excelente)
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de fin de la actividad: 30/09/2008

Experiencia científica y tecnológica

Participación en grupos/equipos de investigación, desarrollo o innovación

- 1 Nombre del grupo:** Grupo de materiales nanoestructurados con aplicaciones tecnológicas
Nombre responsable grupo: Sofía Calero **N.º de componentes:** 16
Código normalizado: RASPA
Entidad a que pertenece: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
N.º de tesis dirigidas: 3
Resultados más relevantes: <http://www.upo.es/raspa/>
Fecha de inicio: 2010, 3 años
- 2 Nombre del grupo:** Química Física de fases condensadas e interfases
Objeto del grupo: Miembro del Plan Andaluz de Investigación FQM-319 desde su constitución en 1999
Código normalizado: FQM-319
Entidad a que pertenece: Junta de Andalucía **Tipo de entidad:** Junta de Andalucía
Fecha de inicio: 1999, 13 años

Actividad científica o tecnológica

Participación en proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

1 **Denominación del proyecto:** Towards more efficient materials for technological applications (ERC Starting Grant)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

European Research Council

Tipo de entidad: ERC

Fecha de inicio: 2011

Fecha de finalización: 2016

Cuantía total: 1.369.080

Fecha de finalización: 2016

2 **Denominación del proyecto:** Simulación molecular en materiales porosos cristalinos como herramienta para optimizar procesos de interés tecnológico y medioambiental. (CTQ2010-16077)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipo de entidad: MICINN

Ciudad: Madrid, Comunidad de Madrid, España

Fecha de inicio: 2010

Fecha de finalización: 2013

Cuantía total: 108.900

Fecha de finalización: 2013

3 **Denominación del proyecto:** Desarrollo de materiales más eficaces para la captura y conversión de gases de efecto invernadero. (P07-FQM-02595)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Andalucía

Tipo de entidad: Consejería de investigación

Ciudad: Sevilla, Andalucía, España

Fecha de inicio: 2007

Fecha de finalización: 2011

Cuantía total: 297.668

Fecha de finalización: 2011

4 **Denominación del proyecto:** Aplicación de Técnicas Computacionales en el diseño de nuevos materiales multifuncionales (CTQ2007-63229/BQU)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad



Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Ciudad: España

Fecha de inicio: 2007

Fecha de finalización: 2010

Cuantía total: 76.230

Fecha de finalización: 2010

5 Denominación del proyecto: Estudio de Mecanismos moleculares en fotocatalisis heterogenea como conexión entre nanoestructura y funcionalidad: Fotooxidación en medios acuosos. CTQ2004-00582/BQU.

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: José Antonio Mejías

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Ciudad: España

Fecha de inicio: 2004

Fecha de finalización: 2007

Fecha de finalización: 2007

6 Denominación del proyecto: Sistemas Complejos con distribución muy heterogénea de cargas. CTQ2004-07730-C02-01/BQU

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Ciudad: España

Fecha de inicio: 2004

Fecha de finalización: 2007

Fecha de finalización: 2007

7 Denominación del proyecto: A Molecular Investigation of Photocatalysis in Zeolites (MERC-CT-2004-006314)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

Comisión Europea. (Structuring the European Research Area – Human Resources and Mobility)

Tipo de entidad: ERC

Fecha de inicio: 2005

Fecha de finalización: 2006

Cuantía total: 40.000

Fecha de finalización: 2006

8 Denominación del proyecto: Teoría y simulación en ordenador de fuel como líquido subenfriado. VEM2003-20574-C03-01

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad



Investigador/es responsable/es: Santiago Lago
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia y Tecnología

Fecha de inicio: 2003
Fecha de finalización: 2006
Fecha de finalización: 2006

9 Denominación del proyecto: Simulación molecular de contaminantes en zeolitas: Adsorción, difusión, separación y fotocatalisis (APP2E05040)

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Sofía Calero

Entidad/es financiadora/s:

Universidad Pablo de Olavide (plan propio de investigación)

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de inicio: 2004
Fecha de finalización: 2005
Cuantía total: 8.400
Fecha de finalización: 2005

10 Denominación del proyecto: Estudio mediante Mecánica Cuántica y Dinámica Molecular de la conversión de la estructura secundaria de las proteínas con especial aplicación a la proteína del prión

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Sanidad y Consumo

Fecha de inicio: 2001
Fecha de finalización: 2003
Fecha de finalización: 2003

11 Denominación del proyecto: Mecánica Estadística y Mecánica Cuántica de fases condensadas e interfases: BQU2001-3615-C02-01

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Fecha de inicio: 2001
Fecha de finalización: 2003
Fecha de finalización: 2003

12 Denominación del proyecto: Simulating Shape Selectivity in Zeolites

Entidad de realización: Universidad de Amsterdam

Investigador/es responsable/es: Berend Smit

Entidad/es financiadora/s:

Dutch Science Foundation (NWO)

Fecha de inicio: 2001
Fecha de finalización: 2003



Fecha de finalización: 2003

- 13 Denominación del proyecto:** Determinación de propiedades dinámicas y de equilibrio de sistemas molecularmente complejos; líquidos y proteínas. PB98-0326

Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

DGES

Tipo de entidad: Agencia Estatal

Fecha de inicio: 1999

Fecha de finalización: 2001

Fecha de finalización: 2001

- 14 Denominación del proyecto:** Teoría y simulación de propiedades termofísicas y espectroscópicas de sistemas molecularmente complejos con especial referencia a líquidos asociados y proteínas. PB97-0229-C03-01.

Entidad de realización: Universidad Complutense de Madrid

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Fecha de inicio: 1998

Fecha de finalización: 1999

Fecha de finalización: 1999

- 15 Denominación del proyecto:** Teoría y simulación de líquidos molecularmente complejos con posibles aplicaciones en diferentes campos científicos en industriales. PB94-0285

Entidad de realización: Universidad Complutense de Madrid

Tipo de entidad: Universidad

Investigador/es responsable/es: Santiago Lago

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT

Fecha de inicio: 1995

Fecha de finalización: 1998

Fecha de finalización: 1998

Participación en contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

- 1 Denominación del proyecto:** Contrato de investigación entre el grupo RASPA y la empresa INABENSA, S.A., para la realización de un estudio sobre la versatilidad de los materiales metalorgánicos en procesos industriales de almacenamiento de dióxido de carbono.

Calidad en que ha participado: Coordinador/a científico/a

Investigador/a responsable: Sofia Calero

Entidad/es financiadora/s:

INSTALACIONES INABENSA, S.A.

Ciudad: España

Fecha inicio: 01/11/2010 , 1 año

Cuantía total: 35.000



- 2 Denominación del proyecto:** Colaboración continuada con Chevron Energy Technology Company
Calidad en que ha participado: Investigador/a
Investigador/a responsable: Sofía Calero
Entidad/es financiadora/s:
CHEVRON ENERGY TECHNOLOGY COMPANY
Fecha inicio: 2001, 12 años

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 21
Fecha: 26/04/2012

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Ana Martin-Calvo; Francisco D. Lahoz-Martin; Sofia Calero.Understanding Carbon Monoxide Capture Using Metal Organic Frameworks.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.116 - 11,pp. 6655 - 6663.03/2012 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Elena Garcia-Perez; Sondre K. Schnell; Juan M. Castillo; Sofia Calero; Signe Kjelstrup; David Dubbeldam; Thijs J. H. Vlugt.External Surface Adsorption on Silicalite-1 Zeolite Studied by Molecular Simulation.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.115 - 31,pp. 15355 - 15360.08/2011 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 3** Almudena Garcia-Sanchez; Emma Eggink; Erin S. McGarrity; Sofia Calero; Thijs J. H. Vlugt.Predictive Model for Optimizing Guest-Host Lennard-Jones Interactions in Zeolites.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.115 - 20,pp. 10187 - 10195.05/2011 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 4** Elena Garcia-Perez; Patrick S. Barcia; Jose A. C. Silva; Alirio E. Rodrigues; Sofia Calero.Influence of the sodium and calcium non-framework cations on the adsorption of hexane isomers in zeolite BEA.THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS.128 - 4-6 ,pp. 695 - 703.03/2011 .ISSN 1432-881X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 5** Juan Jose Gutierrez-Sevillano; Alejandro Caro-Perez; David Dubbeldam; Sofis Calero.Molecular simulation investigation into the performance of Cu-BTC metal-organic frameworks for carbon dioxide-methane separations.PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS.13 - 45,pp. 20453 - 20460.2011.ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 6** Ana Martin-Calvo; Elena Garcia-Perez; Almudena Garcia-Sanchez; Rocio Bueno-Perez; Said Hamad; Sofia Calero.Effect of air humidity on the removal of carbon tetrachloride from air using Cu-BTC metal-organic framework.PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS.13 - 23,pp. 11165 - 11174.2011.ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 7** Sofia Calero; Ana Martin-Calvo; Said Hamad; Elena Garcia-Perez .On the performance of Cu-BTC metal organic framework for carbon tetrachloride gas removal.CHEMICAL COMMUNICATIONS.47 - 1,pp. 508 - 510.2011.ISSN 1359-7345
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 8** S. Calero.Adsorption in Metal-Organic-Frameworks .Comprehensive Inorganic Chemistry II.Elsevier,2011.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
- 9** J. M. Castillo; T. J. H. Vlught; D. Dubbeldam; S. Hamad; S. Calero.Performance of Chiral Zeolites for Enantiomeric Separation Revealed by Molecular Simulation.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.114 - 50,pp. 22207 - 22213.12/2010 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 10** Titus S. van Erp; David Dubbeldam; Sofia Calero; Johan A. Martens.On the application of chiral amplification via adsorption.CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE.65 - 24,pp. 6478 - 6485.12/2010 .ISSN 0009-2509
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 11** A. Garcia-Sanchez; D. Dubbeldam; S. Calero.Modeling Adsorption and Self-Diffusion of Methane in LTA Zeolites: The Influence of Framework Flexibility.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.114 - 35,pp. 15068 - 15074.09/2010 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 12** Juan Jose Gutierrez-Sevillano; David Dubbeldam; Fernando Rey; Susana Valencia; Miguel Palomino; Ana Martin-Calvo; Sofia Calero.Analysis of the ITQ-12 Zeolite Performance in Propane-Propylene Separations Using a Combination of Experiments and Molecular Simulations.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.114 - 35,pp. 14907 - 14914.09/2010 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 13** Tom P. Caremans; Titus S. van Erp; David Dubbeldam; Juan Manuel Castillo; Johan A. Martens; Sofia Calero.Enantioselective Adsorption Characteristics of Aluminum-Substituted MFI Zeolites.CHEMISTRY OF MATERIALS.22 - 16,pp. 4591 - 4601.08/2010 .ISSN 0897-4756
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Titus S. van Erp; David Dubbeldam; Tom P. Caremans; Sofia Calero; Johan A. Martens.Effective Monte Carlo Scheme for Multicomponent Gas Adsorption and Enantioselectivity in Nanoporous Materials.JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS.1 - 14,pp. 2154 - 2158.07/2010 .ISSN 1948-7185
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 15** Jelan Kuhn; Juan Manuel Castillo-Sanchez; Jorge Gascon; Sofia Calero; David Dubbeldam; Thijs J. H. Vlught; Freek Kapteijn; Joachim Gross.Adsorption and Diffusion of Water, Methanol, and Ethanol in All-Silica DD3R: Experiments and Simulations (vol 113C, pg 14290, 2009).JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.114 - 14,pp. 6877 - 6878.04/2010 .ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 16** Rocio Bueno-Perez; Elena Garcia-Perez; Juan Jose Gutierrez-Sevillano; Patrick J. Merkling; Sofia Calero.A Simulation Study of Hydrogen in Metal-Organic Frameworks.ADSORPTION SCIENCE \ TECHNOLOGY.28 - 8-9 ,pp. 823 - 835.2010.ISSN 0263-6174
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 17** Titus S. van Erp; Tom P. Caremans; David Dubbeldam; Ana Martin-Calvo; Sofia Calero; Johan A. Martens.Enantioselective Adsorption in Achiral Zeolites.ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION.49 - 17,pp. 3010 - 3013.2010.ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 18** S. Calero. Modelling of Transport and Accessibility in Zeolites Libro: Zeolites and Catalysis. Reactions and Applications. Zeolites and Catalysis. Reactions and Applications. 1, pp. 335-361. WILEY-VCH, 2010.
Tipo de producción: Capítulos de libros
- 19** J. M. Castillo; T. J. H. Vlught; Sofia Calero. Molecular Simulation Study on the Separation of Xylene Isomers in MIL-47 Metal-Organic Frameworks. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113 - 49, pp. 20869 - 20874. 12/2009. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 20** Jelan Kuhn; Juan Manuel Castillo-Sanchez; Jorge Gascon; Sofia Calero; David Dubbeldam; Thijs J. H. Vlught; Freek Kapteijn; Joachim Gross. Adsorption and Diffusion of Water, Methanol, and Ethanol in All-Silica DD3R: Experiments and Simulation. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113 - 32, pp. 14290 - 14301. 08/2009. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 21** Almudena Garcia-Sanchez; Conchi O. Ania; Jose B. Parra; David Dubbeldam; Thijs J. H. Vlught; Rajamani Krishna; Sofia Calero. Transferable Force Field for Carbon Dioxide Adsorption in Zeolites. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 113 - 20, pp. 8814 - 8820. 05/2009. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 22** Elena Garcia-Perez; Jorge Gascon; Victor Morales-Florez; Juan Manuel Castillo; Freek Kapteijn; Sofia Calero. Identification of Adsorption Sites in Cu-BTC by Experimentation and Molecular Simulation. LANGMUIR. 25 - 3, pp. 1725 - 1731. 02/2009. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 23** J. M. Castillo; D. Dubbeldam; T. J. H. Vlught; B. Smit; S. Calero. Evaluation of various water models for simulation of adsorption in hydrophobic zeolites. MOLECULAR SIMULATION. 35 - 12-13, pp. 1067 - 1076. 2009. ISSN 0892-7022
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 24** Vincent Finsy; Sofia Calero; Elena Garcia-Perez; Patrick J. Merklings; Gill Vedts; Dirk E. De Vos; Gino V. Baron; Joeri F. M. Denayer. Low-coverage adsorption properties of the metal-organic framework MIL-47 studied by pulse chromatography and Monte Carlo simulations. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 11 - 18, pp. 3515 - 3521. 2009. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 25** Juan Manuel Castillo; Thijs J. H. Vlught; Sofia Calero. Understanding Water Adsorption in Cu-BTC Metal-Organic Frameworks. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 112 - 41, pp. 15934 - 15939. 10/2008. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 26** E. Garcia-Perez; J. B. Parra; C. O. Ania; D. Dubbeldam; T. J. H. Vlught; J. M. Castillo; P. J. Merklings; S. Calero. Unraveling the argon adsorption processes in MFI-type zeolite. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 112 - 27, pp. 9976 - 9979. 07/2008. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 27** T. J. H. Vlught; E. Garcia-Perez; D. Dubbeldam; S. Ban; S. Calero. Computing the heat of adsorption using molecular simulations: The effect of strong Coulombic interactions. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 4 - 7, pp. 1107 - 1118. 07/2008. ISSN 1549-9618
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 28** Theo L. M. Maesen; Rajamani Krishna; Jasper M. van Baten; Berend Smit; Sofia Calero; Juan Manuel Castillo Sanchez. Shape-selective n-alkane hydroconversion at exterior zeolite surfaces. JOURNAL OF CATALYSIS. 256 - 1, pp. 95 - 107. 05/2008. ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 29** Bei Liu; Berend Smit; Fernando Rey; Susana Valencia; Sofia Calero. A new united atom force field for adsorption of alkenes in zeolites. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 112 - 7, pp. 2492 - 2498. 02/2008. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 30** Ana Martin-Calvo; Elena Garcia-Perez; Juan Manuel Castillo; Sofia Calero. Molecular simulations for adsorption and separation of natural gas in IRMOF-1 and Cu-BTC metal-organic frameworks. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 10 - 47, pp. 7085 - 7091. 2008. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 31** E. Garcia-Perez; J. B. Parra; C. O. Ania; A. Garcia-Sanchez; J. M. Van Baten; R. Krishna; D. Dubbeldam; S. Calero. A computational study of CO₂, N₂, and CH₄ adsorption in zeolites. ADSORPTION-JOURNAL OF THE INTERNATIONAL ADSORPTION SOCIETY. 13 - 5-6, pp. 469 - 476. 12/2007. ISSN 0929-5607
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 32** Bei Liu; Elena Garcia-Perez; David Dubbeldam; Berend Smit; Sofia Calero. Understanding aluminum location and non-framework ions effects on alkane adsorption in aluminosilicates: A molecular simulation study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 111 - 28, pp. 10419 - 10426. 07/2007. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 33** R. Krishna; J. M. van Baten; E. Garcia-Perez; S. Calero. Incorporating the loading dependence of the Maxwell-Stefan diffusivity in the modeling of CH₄ and CO₂ permeation across zeolite membranes. INDUSTRIAL \ ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. 46 - 10, pp. 2974 - 2986. 05/2007. ISSN 0888-5885
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 34** S. Lago; M. Cortada; M. D. Lobato; F. Gámez; M. Basoalto; J. M. Pedrosa; S. Calero. Can models of charged rods show features of undercooled liquids?. JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS. 134 - 1-3, pp. 136 - 141. 05/2007.
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 35** Elena Garcia-Perez; David Dubbeldam; Bei Liu; Berend Smit; Sofia Calero. A computational method to characterize framework aluminum in aluminosilicates. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 46 - 1-2, pp. 276 - 278. 2007. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 36** Almudena Garcia-Sanchez; Elena Garcia-Perez; David Dubbeldam; Rajamani Krishna; Sofia Calero. A simulation study of alkanes in Linde Type A zeolites. ADSORPTION SCIENCE \ TECHNOLOGY. 25 - 6, pp. 417 - 427. 2007. ISSN 0263-6174
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 37** E. Garcia-Perez; D. Dubbeldam; T. L. M. Maesen; S. Calero. Influence of cation Na/Ca ratio on adsorption in LTA 5A: A systematic molecular simulation study of alkane chain length. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 47, pp. 23968 - 23976. 11/2006. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 38** Bei Liu; Berend Smit; Sofia Calero. Evaluation of a new force field for describing the adsorption behavior of alkanes in various pure silica zeolites. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 41, pp. 20166 - 20171. 10/2006. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 39** R. Krishna; J. M. van Baten; E. Garcia-Perez; S. Calero. Diffusion of CH₄ and CO₂ in MFI, CHA and DDR zeolites. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 429 - 1-3, pp. 219 - 224. 09/2006. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 40** S Calero; MD Lobato; E Garcia-Perez; JA Mejias; S Lago; TJH Vlugt; TLM Maesen; B Smit; D Dubbeldam. A coarse-graining approach for the proton complex in protonated aluminosilicates. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 12, pp. 5838 - 5841. 03/2006. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 41** D Dubbeldam; E Beerdsen; S Calero; B Smit. Dynamically corrected transition state theory calculations of self-diffusion in anisotropic nanoporous materials. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 7, pp. 3164 - 3172. 02/2006. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 42** TLM Maesen; E Beerdsen; S Calero; D Dubbeldam; B Smit. Understanding cage effects in the n-alkane conversion on zeolites. JOURNAL OF CATALYSIS. 237 - 2, pp. 278 - 290. 01/2006. ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 43** S. Lago; M. Cortada; E. Pernil; S. Lopez-Vidal; S. Calero. Searching the microscopic features responsible for an undercooled liquid behavior in charged rods. AIP CONFERENCE PROCEEDINGS. 832, pp. 217 - 220. 2006.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
- 44** S. Calero. Simulación molecular de la adsorción de hidrocarburos en zeolitas con cationes de intercambio. Revista y año de publicación: Anales de la Real Sociedad Española de Química, 102, 1, 21-26 (2006). Anales de la Real Sociedad Española de Química. 102 - 1, pp. 21 - 26. 2006.
Tipo de producción: Revistas de difusión General **Tipo de soporte:** Revista
- 45** M Cortada; S Calero; S Lago. A new insight on the structural changes of linear quadrupole liquids. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 123 - 18, 11/2005. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 46** E. Garcia-Perez; I. M. Torrens; S. Lago; D. Dubbeldam; T. J. H. Vlugt; T. L. M. Maesen; B. Smit; R. Krishna; S. Calero. Elucidating alkane adsorption in sodium-exchanged zeolites from molecular simulations to empirical equations. APPLIED SURFACE SCIENCE. 252 - 3, pp. 716 - 722. 11/2005.
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Libro
- 47** D Dubbeldam; E Beerdsen; S Calero; B Smit. Molecular path control in zeolite membranes. PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA. 102 - 35, pp. 12317 - 12320. 08/2005. ISSN 0027-8424
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 48** E. Garcia-Perez; I. M. Torrens; S. Lago; R. Krishna; B. Smit; S. Calero. Molecular simulation of adsorption of n-alkanes in Na-MFI zeolites. Determination of empirical expressions. MOLECULAR SIEVES: FROM BASIC RESEARCH TO INDUSTRIAL APPLICATIONS, PTS A AND B Book Series: STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS. 158 - a-b, pp. 1097 - 1104. ELSEVIER SCIENCE BV, SARA BURGERHARTSTRAAT 25, PO BOX 211, 1000 AE AMSTERDAM, NETHERLANDS, 2005.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
- 49** S Calero; M Schenk; D Dubbeldam; TLM Maesen; B Smit. The selectivity of n-hexane hydroconversion on MOR-, MAZ-, and FAU-type zeolites. JOURNAL OF CATALYSIS. 228 - 1, pp. 121 - 129. 11/2004. ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 50** S Calero; D Dubbeldam; R Krishna; B Smit; TJH Vlught; JFM Denayer; JA Martens; TLM Maesen. Understanding the role of sodium during adsorption: A force field for alkanes in sodium-exchanged faujasites. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 126 - 36, pp. 11377 - 11386. 09/2004 .ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 51** D Dubbeldam; S Calero; TJH Vlught; R Krishna; TLM Maesen; E Beerdsen; B Smit. Force field parametrization through fitting on inflection points in isotherms. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 93 - 8, 08/2004 .ISSN 0031-9007
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 52** D Dubbeldam; S Calero; TJH Vlught; R Krishna; TLM Maesen; B Smit. United atom force field for alkanes in nanoporous materials. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 108 - 33, pp. 12301 - 12313. 08/2004 .ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 53** TLM Maesen; S Calero; M Schenk; B Smit. Alkane hydrocracking: shape selectivity or kinetics?. JOURNAL OF CATALYSIS. 221 - 1, pp. 241 - 251. 01/2004 .ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 54** S Calero; S Lago; WF van Gunsteren; X Daura. Modelling of the complex between a 15-residue peptide from mSos2 and the N-terminal SH3 domain of Grb2 by molecular-dynamics simulation. CHEMISTRY \ BIODIVERSITY. 1 - 3, pp. 505 - 519. 2004. ISSN 1612-1872
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 55** JFM Denayer; RA Ocakoglu; W Huybrechts; B Dejonckheere; P Jacobs; S Calero; R Krishna; B Smit; GV Baron; JA Martens. High-pressure liquid phase hydroconversion of heptane/nonane mixtures on Pt/H-Y zeolite catalyst. JOURNAL OF CATALYSIS. 220 - 1, pp. 66 - 73. 11/2003 .ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 56** E Beerdsen; D Dubbeldam; B Smit; TJH Vlught; S Calero. Simulating the effect of nonframework cations on the adsorption of alkanes in MFI-type zeolites. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 107 - 44, pp. 12088 - 12096. 11/2003 .ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 57** S Lago; S Lopez-Vidal; B Garzon; JA Mejias; JA Anta; S Calero. Structure of liquids composed of shifted dipole linear molecules. PHYSICAL REVIEW E. 68 - 2, Part 1, 08/2003 .ISSN 1539-3755
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 58** S Calero; S Lago; B Garzon. Classical molecular dynamics simulation of kappa squared factor in resonance energy transfer for linear dipole models. MOLECULAR SIMULATION. 29 - 8, pp. 519 - 525. 08/2003 .ISSN 0892-7022
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 59** S Calero; B Garzon; S Lago. Influence of charge distribution on the thermophysical and dynamical properties of polar linear molecules. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 118 - 24, pp. 11079 - 11091. 06/2003 .ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 60** D Dubbeldam; S Calero; TLM Maesen; B Smit. Incommensurate diffusion in confined systems. PHYSICAL REVIEW LETTERS. 90 - 24, 06/2003 .ISSN 0031-9007
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 61** M Schenk; S Calero; TLM Maesen; TJH Vlught; LL van Benthem; MG Verbeek; B Schnell; B Smit. Shape selectivity through entropy. JOURNAL OF CATALYSIS. 214 - 1, pp. 88 - 99. 02/2003 .ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista



- 62** D Dubbeldam; S Calero; TLM Maesen; B Smit. Understanding the window effect in zeolite catalysis. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 42 - 31, pp. 3624 - 3626. 2003. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 63** E Beerdsen; B Smit; S Calero. The influence of non-framework sodium cations on the adsorption of alkanes in MFI- and MOR-type zeolites. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 106 - 41, pp. 10659 - 10667. 10/2002. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 64** R Krishna; S Calero; B Smit. Investigation of entropy effects during sorption of mixtures of alkanes in MFI zeolite. CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL. 88 - 1-3, pp. 81 - 94. 09/2002. ISSN 1385-8947
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 65** R Krishna; B Smit; S Calero. Entropy effects during sorption of alkanes in zeolites. CHEMICAL SOCIETY REVIEWS. 31 - 3, pp. 185 - 194. 05/2002. ISSN 0306-0012
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 66** M Schenk; S Calero; TLM Maesen; LL van Benthem; MG Verbeek; B Smit. Understanding zeolite catalysis: Inverse shape selectivity revised. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 41 - 14, pp. 2500+ - 2500+. 2002. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 67** E. Beerdsen; S. Calero; and B. Smit. Zeoliten als moleculaire zeef. Revista y año de publicación: Anales Chemisch2Weekblad 8, Chemisch2Weekblad 8. pp. 13. 2002.
Tipo de producción: Artículos en prensa **Tipo de soporte:** Revista
- 68** S Calero; B Smit; R Krishna. Configurational entropy effects during sorption of hexane isomers in silicalite. JOURNAL OF CATALYSIS. 202 - 2, pp. 395 - 401. 09/2001. ISSN 0021-9517
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 69** S Calero; B Garzon; JA Mejias; S Lago. Monte Carlo simulations of symmetric and asymmetric angular model liquids. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 114 - 20, pp. 9075 - 9082. 05/2001. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 70** S Calero; B Smit; R Krishna. Separation of linear, mono-methyl and di-methyl alkanes in the 5-7 carbon atom range by exploiting configurational entropy effects during sorption on silicalite-1. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 3 - 19, pp. 4390 - 4398. 2001. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 71** M Wendland; S Calero; U Weingerl; J Fischer. Description of alternative refrigerants and their mixtures by BACKONE equations. CHEMIE INGENIEUR TECHNIK. 72 - 7, pp. 738 - 742. 07/2000. ISSN 0009-286X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 72** S Calero; B Garzon; S Jorge; JA Mejias; J Tortajada; S Lago. Suitability of the Kihara potential to predict molecular spectra of linear polyatomic liquids. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 104 - 24, pp. 5808 - 5815. 06/2000. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 73** Propiedades Dinámicas y Termodinámicas de Líquidos compuestos por Moléculas Lineales y Complejas a partir de Métodos Mecanoestadísticos. ISBN: 84-669-1629-6. Universidad Complutense de Madrid, 2000.
Tipo de producción: Libro **Tipo de soporte:** Libro



- 74** S Calero; S Lago; B Garzon. A new and more direct test of Hubbard relations from molecular mass distribution influence on linear liquid dynamics. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 111 - 12, pp. 5434 - 5440. 09/1999 .ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 75** S Calero; M Wendland; J Fischer. Description of alternative refrigerants with BACKONE equations. FLUID PHASE EQUILIBRIA. 152 - 1, pp. 1 - 22. 10/1998 .ISSN 0378-3812
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 76** LA Davies; A Gil-Villegas; G Jackson; S Calero; S Lago. Phase equilibria of a square-well monomer-dimer mixture: Gibbs ensemble computer simulation and statistical associating fluid theory for potentials of variable range. PHYSICAL REVIEW E. 57 - 2, Part b, pp. 2035 - 2044. 02/1998 .ISSN 1539-3755
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 77** S Lago; B Garzon; S Calero; C Vega. Accurate simulations of the vapor-liquid equilibrium of important organic solvents and other diatomics. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 101 - 34, pp. 6763 - 6771. 08/1997 .ISSN 1089-5647
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 78** S Calero; B Garzon; LG MacDowell; S Lago. Nonequilibrium properties of linear polar Kihara fluids from molecular dynamics. Results for models and for liquid acetonitrile. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 107 - 6, pp. 2034 - 2045. 08/1997 .ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 79** LG MacDowell; B Garzon; S Calero; S Lago. Dynamical properties and transport coefficients of Kihara linear fluids. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 106 - 11, pp. 4753 - 4767. 03/1997 .ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 80** S. Calero; S. Lago; L.G. MacDowell; B. Garzón; C. Vega. Dynamic and transport properties simulations of linear Kihara fluids. Preliminary results. Revista y año de publicación: Información Tecnológica, 8, 185-191, (1997). Información Tecnológica. 8, pp. 185 - 191. 1997.
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
- 81** C Vega; B Garzon; LG MacDowell; P Padilla; S Calero; S Lago. The vapour-liquid equilibrium of n-alkanes. JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER. 8 - 47, pp. 9643 - 9648. 11/1996 .ISSN 0953-8984
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Nombre del congreso:** ISSHAC-8
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Comité científico
Fecha de realización: 27/08/2012
Fecha de finalización: 31/08/2012
Ciudad: Krakow, Polonia
- 2** **Título:** On the performance of Cu-BTC metal organic frameworks for the removal of pollutants from gas mixtures
Nombre del congreso: EBA9-IBA1
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Internacional no UE



Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Recife, Brasil
Fecha de realización: 06/05/2012
Fecha de finalización: 10/05/2012

3 Nombre del congreso: EBA9-IBA1

Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Comité científico
Ciudad de realización: Recife, Brasil
Fecha de realización: 06/05/2012
Fecha de finalización: 10/05/2012

Ámbito del congreso: Internacional no UE

4 Título: Towards new porous materials for industrial applications using molecular simulations

Nombre del congreso: Multidisciplinary Seminar Program

Tipo evento: Seminario
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Alicante,
Fecha de realización: 02/12/2011
Fecha de finalización: 02/12/2011

Entidad organizadora: Escuela Técnica Superior de Ingeniería Química (ETSEQ)

5 Título: Towards new metal organic frameworks for clean technologies using molecular simulations

Nombre del congreso: Japan-Spain Workshop on New Nanomaterials for Clean Energy Technology

Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Alicante,
Fecha de realización: 11/09/2011
Fecha de finalización: 13/09/2011

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Entidad organizadora: Universidad de Alicante

6 Nombre del congreso: 5th International FEZA Conference

Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Comité organizador
Ciudad de realización: Recife, Brasil
Fecha de realización: 03/07/2011
Fecha de finalización: 07/07/2011

Ámbito del congreso: Internacional no UE

7 Título: Molecular Simulations on Adsorption and Diffusion in Zeolites and Metal Organic Frameworks

Nombre del congreso: European Science and Engineering Program

Tipo evento: Seminario
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Bruselas, Bélgica
Fecha de realización: 01/03/2011
Fecha de finalización: 01/03/2011

Ámbito del congreso: Unión Europea

Entidad organizadora: ExxonMobil

8 Título: La simulación molecular como herramienta de apoyo a los trabajos experimentales en materiales porosos

Nombre del congreso: Ciclo de Seminarios del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN Unidad Mérida

Tipo evento: Seminario

Ámbito del congreso: Nacional



Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Mérida, México
Fecha de realización: 05/08/2010
Fecha de finalización: 05/08/2010
Entidad organizadora: Departamento de Física Aplicada

- 9** **Título:** Enantioselective Adsorption Characteristics of Aluminum Substituted MFI Zeolites
Nombre del congreso: Fundamentals of Adsorption, FOA10
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: Awaji Hyogo, Japón
Fecha de realización: 23/05/2010
Fecha de finalización: 28/05/2010
- 10** **Título:** Molecular Simulation Studies of Gas Separation and Gas Storage using MOFs and Zeolites
Nombre del congreso: CECAM Workshop on Gas Separation and Storage using Porous Materials
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Lausana, Suiza
Fecha de realización: 07/05/2010
Fecha de finalización: 09/05/2010
Entidad organizadora: CECAM
- 11** **Título:** Estudios de Procesos de Adsorción, Difusión y Catálisis en Zeolitas y otros Materiales Cristalinos Utilizando Simulación Molecular
Nombre del congreso: Programa de actividades del Instituto Universitario de Química Organometálica "Enrique Moles"
Tipo evento: Jornada **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Oviedo,
Fecha de realización: 16/03/2010
Fecha de finalización: 16/03/2010
Entidad organizadora: Universidad de Oviedo
- 12** **Título:** Understanding water adsorption in MOFs
Nombre del congreso: 8th VIII Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI)
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: Granada,
Fecha de realización: 13/07/2009
Fecha de finalización: 15/07/2009
- 13** **Título:** Molecular Simulations on Adsorption and Diffusion in Zeolites and Metal Organic Frameworks of alternative refrigerants with BACKONE equations
Nombre del congreso: New Trends in Computational Chemistry for Industrial Applications
Tipo evento: Jornada **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Barcelona,
Fecha de realización: 06/07/2009
Fecha de finalización: 07/07/2009
Entidad organizadora: Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad



- 14** **Nombre del congreso:** ISSHAC-7
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Comité científico
Fecha de realización: 05/07/2009
Fecha de finalización: 05/11/2009
Ciudad: Kazimierz Dolny, Polonia
- 15** **Título:** Simulating adsorption and diffusion processes in Metal-Organic Frameworks
Nombre del congreso: XXXIII Reunión Ibérica de Adsorción
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Madrid,
Fecha de realización: 22/09/2008
Fecha de finalización: 24/09/2008
Entidad organizadora: Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** RSEQ
- 16** **Título:** Nanomaterials for cleaner technologies, CO2 separation and H2 storage
Nombre del congreso: Workshop on Complex Solid State Reactions For Energy Efficient Hydrogen Storage
Tipo evento: Jornada **Ámbito del congreso:** Autonómica
Tipo de participación: Ponencia invitada
Fecha de realización: 19/09/2008
Fecha de finalización: 19/09/2008
Entidad organizadora: Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla **Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación
- 17** **Título:** A theoretical approximation to characterize framework aluminium in aluminosilicates
Nombre del congreso: 8th International Symposium on the Characterisation of Porous Solides
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: Edimburgo, Reino Unido
Fecha de realización: 10/07/2008
Fecha de finalización: 13/07/2008
- 18** **Título:** Adsorción y Separación. Cálculos teóricos
Nombre del congreso: Escuela de Catálisis Tamices moleculares en catálisis
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Fecha de realización: 20/06/2008
Fecha de finalización: 22/06/2008
Entidad organizadora: Grupo de Zeolitas de la Sociedad Española de Catálisis
Ciudad: Benalmádena, Málaga,
- 19** **Título:** Nanomateriales para el uso ecológico de fuentes de energía: recuperación de dióxido de carbono y almacenamiento de hidrógeno
Nombre del congreso: Escuela de Energía y Cambio Climático Fundación Focus-Abengoa: Energías alternativas: alcances y limitaciones
Tipo evento: Seminario **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada



Ciudad de realización: Sevilla,
Fecha de realización: 21/04/2008
Fecha de finalización: 24/04/2008
Entidad organizadora: Fundación Focus-Abengoa

- 20** **Título:** Molecular Simulations in MOFs
Nombre del congreso: MOFS
Tipo evento: Jornada
Tipo de participación: Ponencia invitada
Fecha de realización: 17/01/2008
Fecha de finalización: 18/01/2008
Entidad organizadora: Universidad Tecnológica de Delft
- 21** **Título:** Estudio computacional de la adsorción de CO₂, N₂, Ar y metano en zeolitas
Nombre del congreso: XXXI Reunión Ibérica de Adsorción
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: Tarragona,
Fecha de realización: 27/09/2006
Fecha de finalización: 29/09/2006
Entidad organizadora: Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** RSEQ
- 22** **Nombre del congreso:** ISSHAC-6
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Comité científico
Fecha de realización: 28/08/2006
Fecha de finalización: 02/09/2006
Ciudad: Zakopane, Polonia
- 23** **Título:** Reverse-engineering simulation approach to characterize framework aluminium in aluminosilicates
Nombre del congreso: Taller de Técnicas Avanzadas de Simulación Molecular
Tipo evento: Seminario **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Tarragona,
Fecha de realización: 07/07/2006
Fecha de finalización: 07/07/2006
Entidad organizadora: Universitat Rovira i Virgili
- 24** **Título:** Reverse-engineering simulation approach to characterize framework aluminium in aluminosilicates
Nombre del congreso: Computational Science Symposium
Tipo evento: Jornada **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Fecha de realización: 05/07/2006
Fecha de finalización: 07/07/2006
Entidad organizadora: Universidad Tecnológica de Delft
- 25** **Título:** Simulación molecular de hidrocarburos en zeolitas que contienen cationes de intercambio
Nombre del congreso: Il Symposium de Jóvenes Investigadores
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia



Ciudad de realización: Ciudad Real,
Fecha de realización: 09/11/2005
Fecha de finalización: 11/11/2005

- 26** **Título:** Molecular Simulations in Confined Systems
Nombre del congreso: Taller de aplicaciones modernas de mecánica estadística
Tipo evento: Seminario **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Carmona, Sevilla,
Fecha de realización: 16/04/2005
Fecha de finalización: 18/04/2005
- 27** **Título:** Development of empirical equations to describe alkane adsorption in sodium exchanged zeolites using molecular simulations
Nombre del congreso: I Simposium de Jóvenes Investigadores
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Madrid,
Fecha de realización: 07/11/2004
Fecha de finalización: 09/11/2004
- 28** **Título:** Molecular Simulation Studies of Gas Separation Molecular Simulations of adsorption of alkanes in zeolites and Gas Storage using MOFs and Zeolites
Nombre del congreso: XXIX RIA
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Oporto, Portugal
Fecha de realización: 12/09/2004
Fecha de finalización: 15/09/2004
Entidad organizadora: Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** RSEQ
- 29** **Título:** Development of empirical equations to describe alkane adsorption in sodium exchanged zeolites using molecular simulations
Nombre del congreso: ISSHAC-5
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia
Fecha de realización: 22/08/2004
Fecha de finalización: 25/08/2004
Ciudad: Gdansk, Polonia
- 30** **Título:** Description of alternative refrigerants with BACKONE equations
Nombre del congreso: VDI-GET Thermodynamic Colloquium
Tipo evento: Congreso **Ámbito del congreso:** Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Leipzig, Alemania
Fecha de realización: 05/10/1998
Fecha de finalización: 06/10/1998
Entidad organizadora: VDI-GET **Tipo de entidad:** Agencia Estatal



Otras actividades de divulgación

- 1** **Título u objeto:** Mujer y Ciencia: una realidad con obstáculos
Nombre del evento: II Jornadas Mujer y Ciencia
Tipo de evento: Conferencias impartidas
Fecha de realización: 25/03/2010
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
- 2** **Título u objeto:** Nanomateriales en la remediación del cambio climático: captura de CO2 y almacenamiento de hidrógeno
Nombre del evento: Conferencia en Nanomateriales en la remediación del cambio climático
Tipo de evento: Conferencias impartidas
Fecha de realización: 07/10/2008
Entidad organizadora: Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada
- 3** **Título u objeto:** Experiencias en programas de movilidad
Nombre del evento: Jornada sobre movilidad científica. Oportunidades de financiación para la movilidad de investigadores
Tipo de evento: Conferencias impartidas
Fecha de realización: 27/11/2007
Entidad organizadora: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
- 4** **Nombre del evento:** ERC Launch Conference
Tipo de evento: asistente invitada
Fecha de realización: 27/02/2007
Entidad organizadora: Berlin Branderburg Academy **Tipo de entidad:** Agencia Estatal of Sciences (BBAW)
Ciudad: Berlin, Alemania
- 5** **Nombre del evento:** Liquid Matter Symposium
Tipo de evento: asistente invitada
Fecha de realización: 15/07/1996
Entidad organizadora: Dense Fluids Group
Ciudad: Sheffield, Reino Unido

Experiencias en gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Comités científicos asesores, sociedades científicas

- 1 Título del comité:** International Zeolite Association (sección MOFs)
Ámbito de la actividad: Internacional no UE
Fecha de inicio: 2010 - 2012
- 2 Título del comité:** Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis of Solids (ISSHAC)
Ámbito de la actividad: Unión Europea
Fecha de inicio: 2006 - 2012
- 3 Título del comité:** Marie Curie Fellows Association
Ámbito de la actividad: Unión Europea
Fecha de inicio: 2001 - 2012
- 4 Título del comité:** ESPOU 2008 (Experimental Science in Pablo de Olavide University)
Ámbito de la actividad: Universitaria
Fecha de inicio: 2008 - 2008

Experiencia en organización de actividades de I+D+i

- 1 Título:** XXXVII Reunión Ibérica de Adsorción
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Entidad convocante: Universidad Pablo de Olavide Sevilla
Modo de participación: Organizador
Fecha de inicio: 12/09/2012
Fecha de finalización: 14/09/2012
- 2 Título:** 5th International FEZA Conference
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito de la actividad:** Internacional no UE
Entidad convocante: FEZA
Modo de participación: Organizador
Fecha de inicio: 03/07/2011
Fecha de finalización: 07/07/2011
- 3 Título:** Computational Carbon Capture
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Entidad convocante: CECAM/COST
Ciudad: Laussane, Suiza
Fecha de inicio: 26/07/2010
Fecha de finalización: 28/07/2010
- 4 Título:** Towards new Multifunctional Materials
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Entidad convocante: SIMBIOMA
Ciudad: Sevilla,



Fecha de inicio: 30/06/2010

Fecha de finalización: 02/07/2010

- 5** **Título:** Tercer Ciclo de Seminarios del Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales
Tipo de actividad: Ciclo de Seminarios **Ámbito de la actividad:** Universidad
Entidad convocante: Universidad Pablo de Olavide **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 2009, 1 año
Fecha de finalización: 2010
- 6** **Título:** Towards New Methods to Design Catalytic and Separation Processes in Nanoporous Materials
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Entidad convocante: CECAM/COST
Ciudad: Lyon, Francia
Fecha de inicio: 05/09/2005
Fecha de finalización: 07/09/2005
- 7** **Título:** Understanding Molecular Simulations
Tipo de actividad: Curso **Ámbito de la actividad:** Europea
Entidad convocante: Universidad de Amsterdam
Fecha de inicio: 2007, 15 días

Experiencia de gestión de I+D+i

- 1** **Título/denominación actividad:** Directora de la Oficina de Proyectos Europeos
Tipología de la gestión: Gestión de entidad
Responsabilidad desempeñada: Dirección
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide
Fecha de inicio: 01/07/2011 , 9 meses
- 2** **Título/denominación actividad:** Responsable de Proyectos de Investigación Competitivos
Tipología de la gestión: Gestión de acciones y proyectos de I+D+i
Responsabilidad desempeñada: Investigador Principal
Fecha de inicio: 2004, 13 años

Experiencia en evaluación y revisión de proyectos y artículos de I+D+i

- 1** **Denominación actividad:** Miembro del panel BQU 2009 para la evaluación de los proyectos presentados a la convocatoria 2009 de proyectos de investigación del Plan Nacional de I+D+i BQU 2009
Responsabilidad desempeñada: Evaluador científico de la ANEP (Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva)
Fecha de inicio: 2009, 2009
- 2** **Denominación actividad:** Miembro del comité de evaluación de los programas Ramón y Cajal y Juan de la Cierva 2008
Responsabilidad desempeñada: Evaluador científico de la ANEP (Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva)
Fecha de inicio: 2008, 2008



- 3 Denominación actividad:** Evaluador de proyectos
Responsabilidad desempeñada: Evaluador Científico del Romanian National Council for Development and Innovation
Fecha de inicio: 2011
- 4 Denominación actividad:** Evaluador de proyectos
Responsabilidad desempeñada: Evaluador Científico de NSF
Entidad organizadora: National Science Foundation
Fecha de inicio: 2011
- 5 Denominación actividad:** Evaluador de proyectos
Responsabilidad desempeñada: Evaluador Científico de la NWO
Entidad organizadora: Netherlands Organisation for Scientific Research
Fecha de inicio: 2011
- 6 Denominación actividad:** Evaluadora habitual de proyectos I+D+i
Responsabilidad desempeñada: Evaluador científico de la ANEP (Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva)
Fecha de inicio: 2007
- 7 Responsabilidad desempeñada:** REFEREE habitual de revistas: Journal of the American Chemical Society, Carbon, Chemistry of Materials, Langmuir y Journal of Physical Chemistry entre otras.

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** Universidad de Ámsterdam **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad: Amsterdam, Holanda
Fecha inicio: 01/12/2000 , 3 años
Fecha de finalización: 31/12/2003
Objetivo de la estancia: Posdoctoral
- 2 Entidad de realización:** ETHZ (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich) **Tipo de entidad:** Centro Tecnológico
Ciudad: Zurich, Suiza
Fecha inicio: 01/02/2000 , 15 días
Fecha de finalización: 15/02/2000
Objetivo de la estancia: Doctorado/a
- 3 Entidad de realización:** ETHZ (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich) **Tipo de entidad:** Centro Tecnológico
Ciudad: Zurich, Suiza
Fecha inicio: 01/07/1999 , 3 meses
Fecha de finalización: 01/10/1999
Objetivo de la estancia: Doctorado/a



- 4** **Entidad de realización:** Universidad de Pennsylvania **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad: Filadelfia, Estados Unidos de América
Fecha inicio: 01/07/1998 , 3 meses
Fecha de finalización: 01/10/1998
Objetivo de la estancia: Doctorado/a
- 5** **Entidad de realización:** Universität für Bodenkultur **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad: Viena, Austria
Fecha inicio: 01/09/1997 , 3 meses
Fecha de finalización: 30/11/1997
Objetivo de la estancia: Doctorado/a
- 6** **Entidad de realización:** Universidad de Sheffield **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad: Sheffield, Reino Unido
Fecha inicio: 01/06/1996 , 3 meses
Fecha de finalización: 01/09/1996
Objetivo de la estancia: Doctorado/a

Ayudas y becas obtenidas

- 1** **Denominación de la ayuda:** Beca postdoctoral Marie Curie
Finalidad: Posdoctoral
Entidad que la concede: Comisión Europea **Tipo de entidad:** ERC
Fecha de concesión: 01/12/2001 **Duración de la ayuda:** 2 años
Fecha de finalización: 01/12/2003
Nombre de la entidad: Universidad de Amsterdam, Holanda
- 2** **Denominación de la ayuda:** Contrato Postdoctoral
Finalidad: Posdoctoral
Entidad que la concede: Universidad de Amsterdam **Tipo de entidad:** Universidad
 (Proyecto Pioneer)
Fecha de concesión: 01/12/2000 **Duración de la ayuda:** 1 año
Fecha de finalización: 30/11/2001
Nombre de la entidad: Universidad de Amsterdam, Holanda
- 3** **Denominación de la ayuda:** Beca postdoctoral MEC
Finalidad: Posdoctoral
Entidad que la concede: Ministerio de Educación, Cultura y Deporte
Fecha de concesión: 01/07/2001
Fecha de finalización: 01/08/2001
Nombre de la entidad: Universidad de Amsterdam, Holanda
- 4** **Denominación de la ayuda:** Beca Predoctoral FPI
Finalidad: Predoctoral
Entidad que la concede: Comunidad de Madrid **Tipo de entidad:** CMAM
Fecha de concesión: 01/09/1996 **Duración de la ayuda:** 4 años
Fecha de finalización: 31/08/2000
Nombre de la entidad: Universidad Complutense de Madrid



- 5 Denominación de la ayuda:** Beca de estancias breves en el extranjero
Finalidad: Predoctoral
Entidad que la concede: European Science Foundation
Tipo de entidad: ESF
Fecha de concesión: 01/02/2000
Duración de la ayuda: 15 días
Fecha de finalización: 15/02/2000
Nombre de la entidad: ETHZ (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich) (Zurich, Suiza)
- 6 Denominación de la ayuda:** Beca de estancias breves en el extranjero
Finalidad: Predoctoral
Entidad que la concede: Comunidad de Madrid
Tipo de entidad: CMAM
Fecha de concesión: 20/07/1999
Duración de la ayuda: 3 meses
Fecha de finalización: 01/10/1999
Nombre de la entidad: ETHZ (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich) (Zurich, Suiza)
- 7 Denominación de la ayuda:** Beca de estancias breves en el extranjero
Finalidad: Predoctoral
Entidad que la concede: Comunidad de Madrid
Tipo de entidad: CMAM
Fecha de concesión: 28/07/1998
Duración de la ayuda: 3 meses
Fecha de finalización: 17/10/1998
Nombre de la entidad: Universidad de Pennsylvania (Filadelfia, EEUU)
- 8 Denominación de la ayuda:** Beca de estancias breves en el extranjero
Finalidad: Predoctoral
Entidad que la concede: Comunidad de Madrid
Tipo de entidad: CMAM
Fecha de concesión: 15/09/1997
Duración de la ayuda: 3 meses
Fecha de finalización: 29/11/1997
Nombre de la entidad: Universität für Bodenkultur (Viena, Austria)

Pertenencia a sociedades científicas y asociaciones profesionales

- 1 Denominación:** REVISTA “Materiales en Adsorción y Catálisis”
Entidad de dependencia: Grupo Especializado de Adsorción
Cargo que desempeña: Editora de la Revista
Fecha de inicio: 2010
- 2 Denominación:** LA REVISTA “MoleQla”
Entidad de dependencia: Revista de Química de la Universidad Pablo de Olavide
Cargo que desempeña: Editora de la Revista
Fecha de inicio: 2010
- 3 Denominación:** Real Sociedad Española de Química
Fecha de inicio: 2001
- 4 Denominación:** Grupo Especializado de Adsorción
Entidad de dependencia: Real Sociedad Española de Química
Tipo de entidad: RSEQ
Fecha de inicio: 2001



Menciones, distinciones y premios obtenidos en el desarrollo del ejercicio profesional

- 1 Descripción:** ERC-Starting Grant
Entidad que concede: The European Commission **Tipo de entidad:** Reserach Directorate General
Ciudad: 11/10/2011
Fecha de concesión: 11/10/2011
- 2 Descripción:** Marie Curie Excellence Award
Entidad que concede: The European Commission **Tipo de entidad:** Reserach Directorate General
Ciudad: Dublin, 01/12/2005
Fecha de concesión: 01/12/2005
- 3 Descripción:** Premio Sigma-Aldrich a Investigadores Noveles
Entidad que concede: Real Sociedad Española de **Tipo de entidad:** RSEQ
Química
Ciudad: Madrid, 22/11/2005
Fecha de concesión: 22/11/2005
- 4 Descripción:** Premio Extraordinario de Doctorado correspondiente al curso 2000-2001
Entidad que concede: Universidad Complutense de **Tipo de entidad:** Universidad
Madrid
Ciudad: Madrid, 13/11/2003
Fecha de concesión: 13/11/2003

Número de tramos de investigación reconocidos

- 1 N.º de tramos reconocidos:** 2
Ámbito: Nacional
Entidad que concede: Ministerio de Educación
Fecha del reconocimiento: 13/10/2010
- 2 N.º de tramos reconocidos:** 1
Ámbito: Autonómica
Entidad que concede: Agencia Andaluza de **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Evaluación
Fecha del reconocimiento: 09/11/2006