

CURRICULUM VITÆ

Pablo J. Ordejón Rontomé

April, 2019

1. DATOS PERSONALES

1.1. DATOS PERSONALES

Apellidos: _____ Ordejón Rontomé
Nombre: _____ Pablo Jesús

1.2. SITUACION ACTUAL

Cargo: _____ Director de la Fundación Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología - ICN2
Categoría Profesional: _____ Profesor de Investigación de OPIS
Organismo: _____ Consejo Superior de Investigaciones Científicas Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología - ICN2
Dirección del trabajo: _____ ICN2, Campus de la UAB
08193 Bellaterra, Barcelona, España
Teléfono: +34 93 737 26 46
email: pablo.ordejon@icn2.cat

1.3. FORMACION ACADEMICA

1982-1987

Licenciado en Ciencias Físicas (especialidad Física Fundamental), Universidad Autónoma de Madrid (UAM).

1987-1992

Doctor en Ciencias (Sección Física), UAM. Director de Tesis: Prof. Dr. Félix Ynduráin Muñoz. Apto - Cum Laude.

2. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN

2.1. PUBLICACIONES

ResearcherID: D-3091-201
ORCID: 0000-0002-2353-2793

Alrededor de 26,000 citas en total; 1 artículo con mas de 7.700 citas; 4 artículos con mas de 1000 citas; y 29 artículos con más de 100 citas; indice h = 56.

2.1.1. Artículos en Revistas Indexadas

- 1.- P. Ordejón, E. Martínez y F. Ynduráin
Correlation between electronic structure and local ordering in Hydrogenated Amorphous Silicon.
Phys. Rev. B **40**, 12416 (1989)
- 2.- P. Ordejón, E. Martínez y J. Plans
Vibrational analysis for the all-trans ferroelectric phase conformation of P(VDF) homopolymer and of P(VDF/TrFE) copolymer: A Cluster-Lattice calculation.
J. Polym. Sci. Part B: Polymer Physics. **29**, 811 (1991)
- 3.- P. Ordejón y F. Ynduráin
Non-parametrized calculation of the electronic and vibrational structure of amorphous SiO_x.
Phys. Rev. B (Rapid Commun.) **43**, 4552 (1991)
- 4.- P. Ordejón y F. Ynduráin
Theoretical study of a – SiN_xH_y alloys.
J. Non-Cryst. Solids **137&138**, 891 (1991)
- 5.- P. Ordejón y F. Ynduráin
Local approach to calculate total energies in semiconductors beyond the Hartree-Fock approximation.
Phys. Rev. B **44**, 12794 (1991)
- 6.- C. Ance, F. de Chelle, J. P. Ferraton, G. Leveque, P. Ordejón y F. Ynduráin.
Optical absorption of plasma-deposited silicon oxinitrides.
Appl. Phys. Lett. **60** 1399 (1992)
- 7.- P. Ordejón
Interpretation of the X-ray emission spectra of a – SiO_x.
Solid State Commun. **83**, 175 (1992)
- 8.- P. Ordejón, D. A. Drabold, M. P. Grumbach y R. M. Martin
Unconstrained minimization approach for electronic computations which scales linearly with system size.
Phys. Rev. B **48**, 14646 (1993)
- 9.- P. Ordejón, D. Lebedenko y M. Menon
Improved nonorthogonal tight binding hamiltonian for molecular dynamics simulations of

- silicon clusters.*
Phys. Rev. B **50**, 5645 (1994)
- 10.- F. Ynduráin y P. Ordejón
Electronic structure of amorphous semiconducting alloys.
Philos. Mag. B **70**, 535 (1994)
 - 11.- P. Ordejón, G. Ortiz y P. Phillips
Localization in the interacting random dimer model.
Phys. Rev. B (Rapid Comm.) **50**, 14682 (1994)
 - 12.- P. Ordejón, D. A. Drabold, M. P. Grumbach y R. M. Martin
Linear system size scaling methods for electronic structure calculations.
Phys. Rev. B **51**, 1456 (1995)
 - 13.- S. Itoh, P. Ordejón y R. M. Martin
Order-N tight-binding molecular dynamics on parallel computers.
Computer Physics Commun. **88**, 173 (1995)
 - 14.- P. Ordejón, D. A. Drabold, R. M. Martin y S. Itoh
Linear scaling method for phonon calculations from electronic structure.
Phys. Rev. Lett. **75**, 1324 (1995)
 - 15.- D. Drabold, P. Ordejón, J. J. Dong y R. M. Martin
Spectral properties of large fullerenes: from cluster to crystal.
Solid State Commun. **96**, 833 (1995)
 - 16.- S. Itoh, P. Ordejón, D. Drabold y R. M. Martin
Structure and energetics of giant fullerenes: an order-N molecular dynamics study.
Phys. Rev. B. **53**, 2132 (1996)
 - 17.- P. Ordejón, E. Artacho y J. M. Soler
Selfconsistent order-N density-functional calculations for very large systems.
Phys. Rev. B (Rapid Communications) **53**, 10441 (1996)
 - 18.- G. Ortiz, P. Ordejón, R. M. Martin y G. Chiappe
Quantum phase transitions involving a change in polarization.
Phys. Rev. B. **54**, 13515 (1996)
 - 19.- S. H. Yang, D. A. Drabold, J. B. Adams, P. Ordejón y K. Glassford
DFT studies of small platinum clusters.
J. Phys., Cond. Matt., Letters Section **9**, L39 (1997)
 - 20.- J. Lewis, P. Ordejón y O. Sankey
Electronic-structure-based molecular-dynamics method for large biological molecules: Application to the 10 basepair poly(dG)•poly(dC) DNA double helix.
Phys. Rev. B **55**, 6880 (1997)
 - 21.- J.J.Hinarejos, G.R.Castro, P.Segovia, J.Alvarez, E.G.Michel, R.Miranda, A.Rodríguez-Marco, D.Sánchez-Portal, E.Artacho, F.Ynduráin, S.Yang, P.Ordejón, y J.B.Adams
Surface electronic structure of metastable FeSi(CsCl)(111) epitaxially grown on Si(111).
Phys. Rev. B. (Rapid Comm), **55**, 16065 (1997)
 - 22.- D. Sanchez-Portal, P. Ordejón, E. Artacho y J. M. Soler
Density functional method for very large systems with LCAO basis sets.
International Journal of Quantum Chemistry **65**, 453 (1997)
 - 23.- I. L. Garzón, K. Michaelian, M. R. Beltrán, A. Posada-Amarillas, P. Ordejón, E. Artacho,

- D. Sanchez-Portal, y J. M. Soler
Lowest energy structures of gold nanoclusters.
 Phys. Rev. Lett. **81**, 1600 (1998)
- 24.- P. Ordejón
Order-N tight-binding methods for electronic-structure and molecular dynamics.
 Computational Materials Science **12**, 157 (1998)
- 25.- D. Sanchez-Portal, E. Artacho, J. M. Soler, A. Rubio y P. Ordejón
Ab-initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes.
 Phys. Rev. B **59**, 12678 (1999)
- 26.- A. Rubio, D. Sanchez-Portal, E. Artacho, P. Ordejón y J. M. Soler
Electronic states in a finite carbon nanotube: a one-dimensional quantum box.
 Phys. Rev. Lett. **82**, 3520 (1999)
- 27.- M. Calleja, C. Rey, M. M. G. Alemany, L. J. Gallego, P. Ordejón, D. Sanchez-Portal, E. Artacho, y J.M. Soler
Self-consistent density-functional calculations of the geometries, electronic and magnetic moments of Ni-Al clusters.
 Phys. Rev. B **60**, 2020 (1999)
- 28.- J. Wang, J. A. Hallmark, D. S. Marshall, W. J. Ooms, P. Ordejón, J. Junquera, D. Sanchez-Portal, E. Artacho y J. M. Soler
Bonding and diffusion of Ba on a Si(001) reconstructed surface.
 Phys. Rev. B **60**, 4968 (1999)
- 29.- E. Artacho, D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, A. García, y J. M. Soler
Linear-scaling ab-initio calculations for large and complex systems.
 Physica Status Solidi (b) **215**, 809 (1999)
- 30.- P. A. Fedders, D. A. Drabold, P. Ordejón, G. Fabricius, D. Sanchez-Portal, E. Artacho y J. M. Soler
Application of local spin density approximation to α -Si and tetrahedral α -C
 Phys. Rev. B **60**, 10594 (1999)
- 31.- M. S. C. Mazzoni, H. Chacham, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal, J. M. Soler y E. Artacho
Energetics of the oxidation and opening of a carbon nanotube.
 Phys. Rev. B **60**, R2208 (1999)
- 32.- G. Fabricius, E. Artacho, D. Sanchez-Portal, P. Ordejón, D. A. Drabold y J. M. Soler
Atomic layering at the liquid Si surface: a first-principles simulation
 Phys. Rev. B (Rapid Comm.) **60**, 16283 (1999)
- 33.- D. Sanchez-Portal, E. Artacho. J. Junquera, P. Ordejón, A. García y J. M. Soler
Stiff monoatomic gold wires with a spinning zigzag geometry
 Phys. Rev. Lett. **83**, 3884 (1999)
- 34.- I. L. Garzón, K. Michaelian, M.R. Beltrán, A. Posada-Amarillas, P. Ordejón, E. Artacho, D. Sanchez-Portal y J. M. Soler
Structure and stability of gold nanoclusters: the Au₃₈ case
 European Physics Journal D. **9**, 211 (1999)
- 35.- P. Ordejón
Linear Scaling ab-initio Calculations in Nanoscale Materials with SIESTA
 Phys. Stat. Sol. (b) **217**, 335 (2000)
- 36.- J. M. Soler, M. R. Beltrán, K. Michaelian, I. L. Garzón, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal y

- E. Artacho
Metallic bonding and cluster structure
 Phys. Rev. B **61**, 5771 (2000)
- 37.- J. I. Pascual, J. Gomez-Herrero, A. Baró, D. Sanchez-Portal, E. Artacho, P. Ordejón y J.M. Soler
Seeing molecular orbitals.
 Chem. Phys. Lett. **321**, 78 (2000)
- 38.- J. Izquierdo, A. Vega, L. C. Balbás, D. Sánchez-Portal, J. Junquera, E. Artacho, J. M. Soler y P. Ordejón
Systematic ab-initio study of the electronic and magnetic properties of different pure and mixed iron systems.
 Phys. Rev. B **61**, 13639 (2000)
- 39.- J. M. Oliva, R. Weht, P. Ordejón y E. Canadell
Electronic structure of the superconducting layered ternary nitrides CaTaN_2 and CaNbN_2
 Phys. Rev. B **62**, 1512 (2000)
- 40.- E. Hernandez, P. Ordejón, I. Boustani, A. Rubio y J. A. Alonso
Tight-binding molecular dynamics studies of boron assisted nanotube growth
 J. Chem. Phys. **113**, 3814 (2000)
- 41.- J. I. Pascual, J. Gomez-Herrero, A. Baró, D. Sanchez-Portal, E. Artacho, P. Ordejón y J.M. Soler
Comment on "Identifying molecular orientation of individual C_{60} on a $\text{Si}(111)-7\times 7$ surface"
 Phys. Rev. Lett. (Comment) **85**, 2653 (2000)
- 42.- E. Burgos, E. Halac, Ruben Weht, H. Bonadeo, E. Artacho y P. Ordejón
New superhard phases for 3D C_{60} -based fullerenes
 Phys. Rev. Lett. **85**, 2328 (2000)
- 43.- I. L. Garzón, C. Rovira, K. Michaelian, M. R. Beltrán, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal, J. Junquera, E. Artacho y J. M. Soler
Do thiols merely passivate gold nanoclusters?
 Phys. Rev. Lett. (Comment) **85**, 5250 (2000)
- 44.- P. J. de Pablo, F. Moreno-Herrero, J. Colchero, J. Gómez-Herrero, P. Herrero, A. M. Baró, P. Ordejón, J. M. Soler y Emilio Artacho
Absence of conductivity in λ -DNA
 Phys. Rev. Lett. **85**, 4992 (2000)
- 45.- M. Plazanet, M. R. Johnson, J. D. Gale, T. Yildirim, G. J. Kearley, M. T. Fernández-Díaz, D. Sánchez-Portal, E. Artacho, J. M. Soler, P. Ordejón, A. García y H. P. Trommsdorff
The structure and dynamics of durenene by neutron scattering and numerical modelling using density functional methods
 Chemical Physics **261**, 189 (2000)
- 46.- J. M. Oliva, P. Ordejón y E. Canadell
Electronic structure of monoclinic $\text{TeMo}_5\text{O}_{16}$: prediction of semiconducting behavior
 Phys. Rev. B **62**, 16430 (2000)
- 47.- E. Canadell, P. Ordejón, E. Artacho, D. Sánchez-Portal, A. García y J. M. Soler
Interplay between theory and experiment in solid inorganic chemistry
 J. of Materials Chemistry **11**, 1 (2001)

- 48.- Chu-Chun Fu, M. Weissmann, M. Machado y P. Ordejón
Ab-initio study of silicon multisubstituted neutral and charged fullerenes
Phys. Rev. B **63**, 085411 (2001)
- 49.- J. Junquera, R. Weht y P. Ordejón
Surface electronic structure of metastable FeSi(CsCl)(111)
Surf. Sci. **482-485**, 625 (2001)
- 50.- S. K. Estreicher, M. Gharaibeh, P. A. Fedders y P. Ordejón
Unexpected dynamics for self-interstitial clusters in silicon
Phys. Rev. Lett. **86**, 1247 (2001)
- 51.- F.J. Manjón, D. Errandonea, A. Segura, V. Muñoz, G. Tobías, P. Ordejón y E. Canadell
Experimental and theoretical study of band structure of InSe and In_{1-x}Ga_xSe (x < 0.2) under high pressure: direct to indirect crossovers
Phys. Rev. B **63**, 125330 (2001)
- 52.- S. Sanvito, P. Ordejón y N. A. Hill
First-principles study of the origin and nature of ferromagnetism in Ga_{1-x}Mn_xAs
Phys. Rev. B **63**, 165206 (2001)
- 53.- E. Hernandez, P. Ordejón y H. Terrones
Fullerene growth and the role of non-classical isomers
Phys. Rev. B **63**, 193403 (2001)
- 54.- O. Diéguez, M. M. G. Alemany, C. Rey, P. Ordejón y L. J. Gallego
Density-functional calculations of the structures, binding energies and magnetic moments of Fe clusters with 2 to 17 atoms
Phys. Rev. B **63**, 205407 (2001)
- 55.- I. L. Garzón, E. Artacho, M. R. Beltrán, A. García, J. Junquera, K. Michaelian, P. Ordejón, C. Rovira, D. Sánchez-Portal y J. M. Soler
Hybrid DNA-gold nanostructured materials: an ab-initio approach
Nanotechnology **12**, 126 (2001).
- 56.- S. K. Estreicher, K. Wells, P. A. Fedders y P. Ordejón
Dynamics of interstitial hydrogen molecules in crystalline silicon
J. Phys.: Condens. Matter **13**, 6271 (2001)
- 57.- A. Farajian, M. Mikami, P. Ordejón y K. Tanabe
Ring closure in dioxin formation process: an ab-initio molecular dynamics study
J. Chem. Phys. **115**, 6401 (2001)
- 58.- S. Reich, C. Thomsen y P. Ordejón
Phonon eigenvectors of chiral nanotubes
Phys. Rev. B **64**, 195416 (2001)
- 59.- J. M. Pruneda, J. Junquera, J. Ferrer, P. Ordejón y S. K. Estreicher
Vibrational properties of H-related defects in Si
Physica B **308-310**, 147 (2001)
- 60.- M. Gharaibeh, S. K. Estreicher, P. A. Fedders y P. Ordejón
Self-interstitial-hydrogen complexes in Si
Phys. Rev. B **64**, 235211 (2001)
- 61.- S. K. Estreicher, P. A. Fedders y P. Ordejón
The fascinating dynamics of defects in Silicon
Physica B **308-310**, 1 (2001)

- 62.- S. K. Estreicher, J. L. McAfee, P. A. Fedders, J. M. Pruneda y P. Ordejón
The strange behavior of interstitial H₂ molecules in Si and GaAs
Physica B **308-310**, 202 (2001)
- 63.- J. M. Pruneda, S. Estreicher, J. Junquera, J. Ferrer y P. Ordejón
Ab-initio local vibrational modes of light impurities in silicon
Phys. Rev. B **65**, 075210 (2002)
- 64.- C. Thomsen, S. Reich y P. Ordejón
Ab-initio determination of the phonon deformation potentials of graphene
Phys. Rev. B **65**, 073403 (2002)
- 65.- J.F. Sánchez-Royo, J. Pellicer-Porres, A. Segura, V. Muñoz, G. Tobías, P. Ordejón, E. Canadell y Y. Huttel
Angle-resolved photoemission study and first principles calculation of the electronic structure of GaTe single crystal
Phys. Rev. B **65**, 115201 (2002)
- 66.- C. Rovira, J. Novoa, J. L. de los Mozos, P. Ordejón y E. Canadell
First-principles study of the neutral molecular metal Ni(tm₂dt)₂
Phys. Rev. B (Rapid Communications) **65**, 081104 (2002)
- 67.- J. M. Soler, E. Artacho, J. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón y D. Sánchez-Portal
The Siesta method for ab-initio order-N materials simulation
J. Phys.: Condensed Matter **14**, 2745 (2002)
- 68.- M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor y K. Stokbro
Density-functional method for nonequilibrium electron transport
Phys. Rev. B **65**, 165401 (2002)
- 69.- S. Reich, C. Thomsen y P. Ordejón
Electronic band structure of isolated and bundled carbon nanotubes
Phys. Rev. B **65**, 155411 (2002)
- 70.- S. Reich, C. Thomsen y P. Ordejón
Elastic properties of carbon nanotubes under hydrostatic pressure
Phys. Rev. B **65**, 153407 (2002)
- 71.- J. L. Mozos, P. Ordejón y E. Canadell
First-principles study of the blue bronze K_{0.3}MoO₃
Phys. Rev. B **65**, 233105 (2002)
- 72.- A. V. Postnikov, P. Entel y P. Ordejón
SnO₂: bulk and surface simulations by an ab initio numerical orbitals method
Phase Transitions **75**, 143 (2002)
- 73.- R. Rurali, E. Hernandez, P. Godignon, J. Rebollo y P. Ordejón
Ab initio calculations of B diffusion in SiC
Materials Science Forum, **389-393**, 553 (2002).
- 74.- J.-L. Mozos, P. Ordejón, M. Brandbyge, J. Taylor y K. Stokbro
Simulations of quantum transport in nanoscale systems: application to atomic gold and silver wires
Nanotechnology **13**, 346 (2002)
- 75.- S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen y P. Ordejón
Tight-binding description of graphene
Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002)

- 76.- I. Justicia, P. Ordejón, G. Canto, J. L. Mozos, J. Fraxedas, G. A. Battiston, R. Gerbasi y A. Figueras
Designed self-doped titanium oxide thin films for efficient visible-light photocatalysis
Advanced Materials **14**, 1399 (2002)
- 77.- M. Machón, S. Reich, C. Thomsen, D. Sánchez-Portal y P. Ordejón
Ab-initio calculations of the optical properties of 4 Å-diameter single-walled nanotubes
Phys. Rev. B **66**, 155410 (2002)
- 78.- R. Rurali, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón y E. Hernández
Theoretical evidence for the kick-out mechanism for B diffusion in SiC
Appl. Phys. Lett. **81**, 2989 (2002)
- 79.- F. Claeysens, N. L. Allan, P. W. May, P. Ordejón y J. M. Oliva
Solid phosphorous carbide?
Chemical Communications **21**, 2494 (2002)
- 80.- D. Scherlis, M. Martí, P. Ordejón y D. Estrín
Environment effects on chemical reactivity of heme proteins
Int. J. Quantum Chem. **90**, 1505 (2002)
- 81.- C. Quiros, O. Robach, H. Isern, P. Ordejón y S. Ferrer
Compressibility of CO adsorbed on Ni(111) from 10^{-6} mbar to 1.2 bar ambient CO pressures investigated with X-ray diffraction
Surface Science **522**, 161 (2003)
- 82.- A. Segura, F. J. Manjón, D. Errandonea, J. Pellicer-Porres, V. Muñoz, G. Tobias, P. Ordejón, E. Canadell, A. San Miguel, D. Sánchez-Portal
Specific features of the electronic structure of III-VI layered semiconductors: recent results on structural and optical measurements under pressure and electronic structure calculations
Phys. Stat. Sol. (b) **235**, 267 (2003)
- 83.- S. Reich, C. Thomsen y P. Ordejón
Elastic properties and pressure induced phase transitions in single-walled carbon nanotubes
Phys. Stat. Sol. (b) **235**, 354 (2003).
- 84.- E. Artacho, M. Machado, D. Sánchez-Portal, P. Ordejón y J. Soler
Electrons in Dry DNA from Density Functional Calculations
Mol. Phys. **101**, 1587 (2003)
- 85.- J. Junquera, M. Zimmer, P. Ordejón y P. Ghosez
First principles calculation of the band offset at BaO/BaTiO₃ and SrO/SrTiO₃ interfaces
Phys. Rev. B **67**, 155327 (2003)
- 86.- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo y P. Ordejón
First principles studies of neutral vacancies diffusion in SiC
Comput. Mat. Sci. **27**, 36 (2003)
- 87.- K. Stokbro, J. Taylor, M. Brandbyge, J.-L. Mozos y P. Ordejón
Theoretical study of the nonlinear conductance of di-thiol benzene coupled to Au(111) surfaces via thiol and thiolate bonds
Comput. Mat. Sci. **27**, 151 (2003)
- 88.- M. Brandbyge, K. Stokbro, J. Taylor, J.-L. Mozos y P. Ordejón
Origin of current-induced forces in an atomic gold wire: A first-principles study
Phys. Rev. B **67**, 193104 (2003)
- 89.- Y. J. Lee, R. M. Nieminen, P. Ordejón y E. Canadell

- First-principles characterization of the electronic structure of the molecular superconductor $\beta - (BEDT - TTF)_2IBr_2$*
 Phys. Rev. B **67**, 180505 (2003)
- 90.- R. Rurali, P. Godignon, J. Rebollo, P. Ordejón y E. Hernández
First-principles study of n-type dopants and their clustering in SiC
 Appl. Phys. Lett., **82**, 4298 (2003).
- 91.- M. A. Martí, D. A. Scherlis, F. A. Doctorovich, P. Ordejón y D. A. Estrin
Modulation of the NO trans effect in heme proteins: implications for the activation of soluble guanylate cyclase
 J. Biol. Inorg. Chem. **8**, 595 (2003)
- 92.- G. Canto, P. Ordejón, H. Cheng, A. C. Cooper y G. P. Pez
First-principles molecular dynamics study of the stretching frequencies of hydrogen molecules in carbon nanotubes
 New J. Phys. **5**, 124 (2003)
- 93.- A. Gali, P. Deák, P. Ordejón, N. T. Son, E. Janzén, y W. J. Choyke
Aggregation of carbon interstitials in silicon carbide: A theoretical study
 Phys. Rev. B **68**, 125201 (2003)
- 94.- J. Fraxedas, Y. J. Lee, I. Jiménez, R. Gago, R. M. Nieminen, P. Ordejón y E. Canadell
Characterization of the unoccupied and partially occupied states of TTF-TCNQ by XANES and first-principles calculations
 Phys. Rev. B **68**, 195115 (2003)
- 95.- A. Crespo, D. A. Scherlis, M. A. Martí, P. Ordejón, A. E. Roitberg y D. A. Estrin
A DFT based QM-MM Approach Designed for the Treatment of Large Molecular Systems: Application to Chorismate Mutase
 J. Phys. Chem. B **107**, 13728 (2003)
- 96.- P. Deák, A. Gali, A. Solyom, P. Ordejón, K. Kamaras y G. Battistig
Studies of boron-interstitial clusters in Si
 J. Phys.: Cond. Matt. **15** 4967 (2003)
- 97.- P. Deák, A. Gali, J. Knaup, Z. Hajnal, Th. Frauenheim, P. Ordejón y J. W. Choyke
Defects in the SiC/SiO₂ interface: energetics of the elementary steps of the oxidation reaction
 Physica B **340-342**, 1069 (2003)
- 98.- M. S. Craig, M. C. Warren, M. T. Dove, J. D. Gale, D. Sanchez-Portal, P. Ordejón, J. M. Soler y E. Artacho
Simulations of minerals using density functional theory based on atomic orbitals for linear scaling
 Phys. Chem. Minerals **31**, 12 (2004)
- 99.- X. Blase y P. Ordejón
Dynamical screening and absorption within a strictly localized basis implementation of time-dependent LDA: From small clusters and molecules to aza-fullerenes
 Phys. Rev. B **69**, 085111 (2004)
- 100.- J. Maultzsch, S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt y P. Ordejón
Phonon dispersion in graphite
 Phys. Rev. Lett. **92**, 075501 (2004)
- 101.- R. Atta-Fynn, P. Biswas, P. Ordejón y D. A. Drabold

- Systematic study of electron localization in an amorphous semiconductor*
Phys. Rev. B **69**, 085207 (2004)
- 102.- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo y P. Ordejón
First-principles studies of the diffusion of B impurities and vacancies in SiC
Phys. Rev. B **69**, 125203 (2004)
- 103.- Chu-Chun Fu, F. Willaime y P. Ordejón
Stability and mobility of mono- and di-interstitials in α -Fe
Phys. Rev. Lett. **92**, 175503 (2004)
- 104.- D. A. Scherlis, Y. J. Lee, C. Rovira, S. Adams, R. M. Nieminen, P. Ordejón y E. Canadell
Concerning the origin of superstructures in hydrogen molybdenum bronzes H_xMoO_3
Solid State Ionics **168**, 291 (2004)
- 105.- F. El-Mellouhi, N. Mousseau y P. Ordejón
Sampling the diffusion paths of a neutral vacancy in silicon
Phys. Rev. B **70**, 205202 (2004)
- 106.- P. Jensen, X. Blase y P. Ordejón
First principles study of gold adsorption and diffusion on graphite: an ab-initio study
Surface Science **564**, 173 (2004)
- 107.- F. J. Manjón, A. Segura, V. Muñoz-Sanjosé, G. Tobias, P. Ordejón y E. Canadell
Band structure of indium selenide investigated by intrinsic photoluminescence under high pressure
Phys. Rev. B **70**, 125201 (2004)
- 108.- E. Wachowicz, R. Rurali, P. Ordejón y P. Hyldgaard
First stages of the oxidation of the Si-rich 3C-Si(001) surface
Computational Materials Science **33**, 13 (2005)
- 109.- M. Machón, S. Reich, H. Telg, J. Maulzsch, P. Ordejón y C. Thomsen
Strength of radial breathing mode in single-walled carbon nanotubes
Phys. Rev. B **71**, 035416 (2005)
- 110.- D. Errandonea, A. Segura, F. J. Manjón, A. Chevy, E. Machado, G. Tobias, P. Ordejón y E. Canadell
Crystal symmetry and pressure effects on the valence band structure of γ -InSe and ϵ -GaSe: Transport measurements and electronic structure calculations
Phys. Rev. B **71**, 125206 (2005)
- 111.- J.L. Mozos, E. Machado, E. Hernández y P. Ordejón
Nanotubes and nanowires: the effect of impurities and defects on their electronic properties
Int. J. Nanotechnology **2**, 114 (2005)
- 112.- E. Machado, M. Kaczmariski, P. Ordejón, D. Garg, J. Norman y H. Cheng
First-principles analyses and predictions on the reactivity of barrier layers of Ta and TaN toward organometallic precursors for deposition of copper films
Langmuir **21**, 7608 (2005)
- 113.- E. Fernandez, P. Ordejón y L. C. Balbás
Theoretical study of O₂ and CO adsorption on (Au)_n clusters (n=5-10)
Chemical Physics Letters **408**, 252 (2005)
- 114.- I. Justicia, G. García, L. Vázquez, J. Santiso, P. Ordejón, G. A. Battiston, R. Gerbasi y A. Figueras
Self-doped titanium oxide thin films for efficient visible light photocatalysis. An example:

- Nonylphenol photodegradation*
Sensors and Actuators B **109**, 52 (2005)
- 115.- H. A. Al-Britthen, M. B. Haider, R. Yang, C. Constantin, E. Lu, N. Sandler, A. Smith y P. Ordejón.
Scanning tunneling microscopy and surface simulation of c-GaN(001) intrinsic $4\times$ reconstruction: linear tetramers?
Phys. Rev. Lett. **95**, 146102 (2005)
- 116.- R. Rurali, N. Lorente y P. Ordejón
Comment on "Molecular distortions and chemical bonding of a large π -conjugated molecule on a metal surface"
Phys. Rev. Lett. (Comment) **95**, 209601 (2005)
- 117.- C. Constantin, M. B. Haider, D. Ingram, A. R. Smith, N. Sandler, K. Sun y P. Ordejón
Composition-Dependent Structural Properties in ScGaN Alloy Films: A Combined Experimental and Theoretical Study
J. Appl. Phys. **98**, 123501 (2005)
- 118.- D. Errandonea, D. Martínez-García, A. Segura, A. Chevy, G. Tobias, E. Canadell, y P. Ordejón
High-pressure, high-temperature phase diagram of InSe: A comprehensive study of the electronic and structural properties of the monoclinic phase of InSe under high pressure
Phys. Rev. B **73**, 235202 (2006)
- 119.- M. Berthe, A. Urbieto, L. Perdigo, B. Grandidier, D. Deresmes, C. Delerue, D. Stievenard, R. Rurali, N. Lorente, L. Magaud, y P. Ordejón
Electron Transport via Local Polarons at Interface Atoms
Phys. Rev. Lett. **97**, 206801 (2006)
- 120.- E. Machado-Charry, P. Ordejón, E. Canadell, C. Brun, y Z. Z. Wang
Analysis of scanning tunneling microscopy images of the charge-density-wave phase in quasi-one-dimensional $Rb_{0.3}MoO_3$
Phys. Rev. B **74**, 155123 (2006)
- 121.- A. Rodriguez-Forteza, C. Rovira, P. Ordejón, C. Herold, P. Lagrange, y E. Canadell
Electronic structure and charge transfer in the ternary intercalated graphite beta- $KS_{0.25}C_3$
Inorganic Chemistry **45**, 9387 (2006)
- 122.- G. Canto y P. Ordejón
First principles slab relaxation of the TiFe(001) surface
Surface Reviews and Letters **13**, 495 (2006)
- 123.- A. Segura, D. Errandonea, D. Martínez García, F. J. Manjón, A. Chevy, G. Tobías, P. Ordejón y E. Canadell
Transport measurements under pressure in III-IV layered semiconductors
physica status solidi (b) **244**, 162 (2007)
- 124.- J. Pellicer-Porres, E. Machado-Charry, A. Segura, S. Gilliland, E. Canadell, P. Ordejón, A. Polian, P. Munsch, A. Chevy and N. Guignot
GaS and InSe equations of state from single crystal diffraction
physica status solidi (b) **244**, 169 (2007)
- 125.- R. J. C. Batista, P. Ordejón, H. Chacham y E. Artacho
Resistive and rectifying effects of puling gold atoms at thiol-gold nano-contacts
Physical Review B. **75**, 041402(R) (2007)
- 126.- E. Machado, M. Kaczmarek, B. Braida, P. Ordejón, D. Garg, J. Norman y H. Cheng
Interaction of copper organometallic precursors with barrier layers of Ti, Ta and W and

- their nitrides: a first-principles molecular dynamics study*
Journal of Molecular Modeling **13**, 861 (2007)
- 127.- J.D. Prades, A. Cirera, J. R. Morante, J. M. Pruneda y P. Ordejón
Ab-initio study of NO_x compounds adsorption on SnO₂ surface
Sensors and Actuators B **126**, 62 (2007)
- 128.- E. Artacho, E. Anglada, O. Dieguez, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, R. M. Martín,
P. Ordejón, J. M. Pruneda, D. Sánchez-Portal and J. M. Soler
The SIESTA method; developments and applicability
J. Phys.: Condens. Matter **20**, 064208 (2008)
- 129.- R. Rurali, E. Wachowicz, P. Hyldgaard y P. Ordejón
Band bending and quasi-2DEG in the metallized beta-SiC(001) surface
Physica Status Solidi - Rapid Research Letters **2**, 218 (2008)
- 130.- S. García-Gil, A. García, N. Lorente y P. Ordejón
Optimal strictly localized basis sets for noble metal surfaces
Phys. Rev. B **79**, 075441 (2009)
- 131.- C. Martínez-Boubeta, Ll. Balcells, C. Monty, P. Ordejón y B. Martínez
Tunneling spectroscopy in core/shell structured Fe/MgO nanosphere
Appl. Phys. Lett. **94**, 062507 (2009).
- 132.- N. Leconte, J. Moser, P. Ordejón, H. Tao. A. Lherbier, A. Bachtold, F. Alsina, C. M.
Sotomayor, J.-C. Charlier y S. Roche
Damaging graphene with ozone treatment: a chemically tunable metal-insulator transition
ACS Nano **4**, 4033 (2010).
- 133.- R. Koryar, M. Pruneda, J. Junquera, P. Ordejón, N. Lorente
*Band selection and disentanglement using maximally-localized Wannier functions: the
cases of Co impurities in bulk copper and the Cu (111) surface.*
J. Phys.: Cond. Matt. **22**, 385601 (2010).
- 134.- A. Mugarza, N. Lorente, P. Ordejón, C. Krull, S. Stepanow, M.-L. Bocquet, J. Fraxedas,
G. Ceballos y P. Gambardella
*Orbital specific chirality and homochiral self-assembly of achiral molecules induced by
charge transfer and spontaneous symmetry breaking.*
Phys. Rev. Lett. **105**, 115702 (2010).
- 135.- R. Sánchez de Armas, J. Oviedo, M.A. San Miguel, J. Fdez. Sanz, P. Ordejón y M.
Pruneda,
*Real-time TD-DFT simulations in dye-sensitized solar cells: the electronic absorption
spectrum of alizarin supported on TiO₂ nanoclusters*
Journal of Chemical Theory and Computation **6**, 2856 (2010).
- 136.- P. Foury-Leylekian, J.-P. the, Y.-J. Lee, R. M. Nieminen, P. Ordejón y E. Canadell,
*Density-wave instability in α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ studied by x-ray diffuse scatter-
ing and by first-principles calculations*
Phys. Rev. B **82**, 134116 (2010)
- 137.- F. D. Novaes, R. Rurali y P. Ordejón
Electronic Transport between Graphene Layers Covalently Connected by Carbon Nanotubes
ACS Nano **4**, 7596 (2010)
- 138.- C. F. Sanz-Navarro, R. Grima, A. García, E. A. Bea, A. Soba, J. M. Cela y P. Ordejón,
An efficient implementation of a QM-MM method in SIESTA
Theoretical Chemistry Accounts **128**, 825 (2011)
- 139.- N. Leconte, D. Soriano, S. Roche, P. Ordejón, J.-C. Charlier y J. J. Palacios
Magnetism-Dependent Transport Phenomena in Hydrogenated Graphene: from Spin-splitting

- to *Localization Effects*
ACS Nano **5**, 3987 (2011)
- 140.- D. Soriano, N. Leconte, P. Ordejón, J.-C. Charlier, J. J. Palacios y S. Roche
Magnetoresistance and Magnetic Ordering Fingerprints in Hydrogenated Graphene
Phys. Rev. Lett. **107**, 016602 (2011)
- 141.- J. Fraxedas, S. García-Gil, S. Monturet, N. Lorente, I. Fernández-Torrente, J. J. Franke,
J. I. Pascual, A. Vollmer, R. -P. Blum, N. Koch y P. Ordejón
*Modulation of surface charge transfer through competing long-range repulsive versus short-
range attractive interactions*
J. Phys. Chem. C **115**, 18640 (2011).
- 142.- J. R. Blas, O. Huertas, C. Tabares, B. G. Sumpter, M. Fuentes-Cabrera, M. Orozco, P.
Ordejón y F. J. Luque
*Structural, Dynamical and Electronic Transport Properties of Modified DNA Duplexes
Containing Size-Expanded Nucleobases*
J. Phys. Chem B **115**. 11344 (2011)
- 143.- A. Cresti, A. Lopez-Benazilla, P. Ordejón y S. Roche
Oxygen surface functionalization of graphene nanoribbons for transport gap engineering
ACS Nano, **5**, 9271 (2011)
- 144.- N. Leconte, A. Lherbier, F. Varchon, P. Ordejón, S. Roche y J.-C. Charlier
*Quantum Transport in Chemically-modified Two-Dimensional Graphene: From Minimal
Conductivity to Anderson Localization*
Phys. Rev. B **84**, 235420 (2011)
- 145.- D.I. Bilc, F. D. Novaes, J. Iñiguez, P. Ordejón y P. Ghosez
Electroresistance Effect in Ferroelectric Tunnel Junctions with Symmetric Electrodes
ACS Nano **6**, 1473 (2012)
DOI: 10.1021/nm2043324
- 146.- A. Cammarata, P. Ordejón, A. Emanuele y D. Duca
*Y:BaZrO₃ perovskite compounds I: study of the unprotonated and protonated local struc-
tures*
Chemistry - An Asian Journal **7**, 1827 (2012)
DOI: 10.1002/asia.201100974
- 147.- E. Malic, A. Setaro, P. Bluemmel, C. F. Sanz-Navarro, P. Ordejon, S. Reich and A. Knorr
Carbon nanotubes as substrates for molecular spiropyran-based switches
J. of Phys.: Cond. Matt. **24**, 394006 (2012)
DOE: 10.1088/0953-8984/24/39/394006
- 148.- S. García-Gil, A. García y P. Ordejón
Calculation of core level shifts within DFT using pseudopotentials and localized basis sets
European Physical Journal B **85**, 239 (2012)
DOI: 10.1140/epjb/e2012-30334-5
- 149.- H. Hübener, M. A. Pérez-Osorio, P. Ordejón y F. Giustino
*Performance of local orbital basis sets in the self-consistent Sternheimer method for di-
electric matrices of extended systems*
European Physical Journal B **85**. 321 (2012)
DOI: 10.1140/epjb/e2012-30106-3
- 150.- H. Hübener, M. A. Pérez-Osorio, P. Ordejón y F. Giustino
*Dielectric screening in extended systems using the self-consistent Sternheimer equation
and localized basis sets*
Phys. Rev. B **85**, 245125 (2012)

- DOI: 10.1103/PhysRevB.85.245125
- 151.- D. Van Tuan, A. Kumar, S. Roche, F. Ortmann, M. F. Thorpe y P. Ordejón
Insulating behavior of an amorphous graphene membrane
 Phys. Rev. B **86**, 121408 (2012)
 DOI: 10.1103/PhysRevB.86.121408
- 152.- A. V. Chinchore, K. Wang, M. Shi, A. Mandru, Y. Liu, M. Haider, A. R. Smith, V. Ferrari, M. A. Berral y P. Ordejón
Manganese 3×3 and $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - $R30^\circ$ structures and structural phase transition on w - $GaN(000\bar{1})$ studied by scanning tunneling microscopy and first-principles theory
 Phys. Rev. B **87**, 165426 (2013)
 DOI: 10.1103/PhysRevB.87.165426
- 153.- A. E. Cappelluti, R. Roldán, J. A. Silva-Guillen, P. Ordejón y F. Guinea
Tight-binding model and direct-gap/indirect-gap transition in single-layer and multilayer MoS_2 .
 Phys. Rev. B **87**, 075409 (2013)
 DOI: 10.1103/PhysRevB.88.075409
- 154.- R. Roldán, M. P. López-Sancho, F. Guinea, E. Cappelluti, J. A. Silva-Guillén y P. Ordejón
Momentum dependence of spin-orbit interaction effect in single-layer and multi-layer transition metal dichalcogenides
 2D Materials **1**, 034003 (2014)
 DOI: 10.1088/2053-1583/1/3/034003
- 155.- R. Roldán, J. A. Silva-Guillén, M. P. López-Sancho, F. Guinea, E. Cappelluti y P. Ordejón
Electronic properties of single-layer and multilayer transition metal dichalcogenides MX_2 ($M=Mo, W$ and $X=S, Se$)
 Annalen der Physik **526**, 347 (2014)
 DOI: 10.1002/andp.201400128
- 156.- G. T. Feliciano, C. Sanz-Navarro, M. D. Coutinho-Neto, P. Ordejón, R. H. Scheicher y A. R. Rocha
Capacitive DNA detection driven by electronic charge fluctuations in graphene nanopores
 Phys. Rev. Applied **3**, 034003 (2015)
 DOI: 10.1103/PhysRevApplied.3.034003
- 157.- J. A. Silva-Guillén, Y. Noat, T. Cren, W. Sacks, E.- Canadell y P. Ordejón
Tunneling and electronic structure of the two-gap superconductor MgB_2
 Phys. Rev. B **92**, 064514 (2015)
 DOI: 10.1103/PhysRevB.92.064514
- 158.- Y. Noat, J. A. Silva-Guillen, T. Cren, V. Cherkez, C. Brun, S. Pons, F. Debontridder, D. Roditchev, W. Sacks, L. Cario, P. Ordejón, A. García y E. Canadell
Quasiparticle spectra of $2H-NbSe_2$: Two-band superconductivity and the role of tunneling selectivity
 Phys. Rev. B **92**, 134510 (2015)
 DOI: 10.1103/PhysRevB.92.134510
- 159.- M. Brotons-Gisbert, D. Andrés-Penares, J. Suh, F. Hidalgo, R. Abargues, P. J. Rodríguez-Cantó, A. Segura, A. Cros, G. Tobias, E. Canadell, P. Ordejón, J. Wu, J. P. Martínez-Pastor, J. F. Sánchez-Royo
Nanotexturing to enhance photoluminescent response of a two-dimensional semiconductor with highly tunable band gap
 Nano Letters **16**, 3221 (2016).

- DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b00689
- 160.- J. Silva-Guillén, F. Guinea, P. Ordejón, E. Canadell
Electronic structure of 2H-NbSe₂ single-layers in the CDW state
2D Materials **3**, 035028 (2016).
DOI: 10.1088/2053-1583/3/3/035028
- 161.- K. Song, D. Soriano, R. Robles, P. Ordejón, S. Roche
How disorder affects topological surface states in the limit of ultrathin Bi₂Se₃ films
2D Materials **3**, 045007 (2016).
DOI: 10.1088/2053-1583/3/4/045007
- 162.- J. A. Silva-Guillén, E. Canadell, P. Ordejón, F. Guinea, R. Roldán
Anisotropic features in the electronic structure of the two-dimensional transition metal trichalcogenide TiS₃: electron doping and plasmons
2D Materials **4**, 025085 (2017).
DOI: 10.1088/2053-1583/aa6b92
- 163.- P. Ordejón, D. Boskovic, M. Panhans, F. Ortmann
Ab initio study of electron-phonon coupling in rubrene
Phys. Rev. B **96**, 035202 (2017).
DOI: 10.1103/PhysRevB.96.035202
- 164.- A. Quintana, Z. Zhang, E. Isarain-Chavez, E. Menendez, R. Cuadrado, R. Robles, M. D. M. Guerrero, S. Pane, B. J. Nelson, C. M. Muller, P. Ordejón, J. Nogues, E. Pellicer, J. Sort
Voltage-Induced Coercivity Reduction in Nanoporous Alloy Films: A Boost toward Energy-Efficient Magnetic Actuation
Adv. Func. Materials **27**, 1701904 (2017).
DOI: 10.1002/adfm.201701904
- 165.- F. Bonell, M. G. Cuxart, K. N. Song, R. Robles, P. Ordejón, S. Roche, A. Mugarza, S. O. Valenzuela
Growth of Twin-Free and Low-Doped Topological Insulators on BaF₂(111)
Crystal Growth & Design **17**, 4655 (2017).
DOI: 10.1021/acs.cgd.7b00525
- 166.- S. Illera, M. Pruneda, L. Colombo, P. Ordejon
Thermal and transport properties of pristine single-layer hexagonal boron nitride: A first principles investigation
Phys. Rev. Materials **1**, 044006 (2017).
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.1.044006
- 167.- G. Feliciano, C. Sanz-Navarro, M. D. Coutinho-Neto, P. Ordejón, R. H. Scheicher, A. R. Rocha
Addressing the Environment Electrostatic Effect on Ballistic Electron Transport in Large Systems: A QM/MM-NEGF Approach
J. Phys. Chem. B, **122**, 485 (2018)
DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b03475.
- 168.- K. Song, D. Soriano, A. W. Cummings, R. Robles, P. Ordejón and S. Roche
Spin Proximity Effects in Graphene/Topological Insulator Heterostructures
Nano Lett. **18**, 2033 (2018).
DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b05482
- 169.- B. Guster, E. Canadell, M. Pruneda and P. Ordejón
First principles analysis of the CDW instability of single-layer 1T-TiSe₂ and its evolution with charge carrier density

- 2D Mater. **5** 025024 (2018)
DOI: 10.1088/2053-1583/aab568
- 170.- M. Brotons-Gisbert, A. Segura, R. Robles, E. Canadell, P. Ordejón, y J. F. Sánchez-Royo
Optical and electronic properties of 2H-MoS₂ under pressure: Revealing the spin-polarized nature of bulk electronic bands
Phys. Rev. Mat. **2**, 054602 (2018)
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.054602
- 171.- R. Cuadrado, M. Pruneda, A. García y P. Ordejón
Implementation of non-collinear spin-constrained DFT calculations in SIESTA with a fully relativistic Hamiltonian
J. Phys.: Mater. **1**, 015010 (2018)
DOI: 10.1088/2515-7639/aae7db
- 172.- M. R. Rodríguez-Laguna, A. Castro-Alvarez, M. Sledzinska, J. Maire, F. Costanzo, B. Ensing, M. Pruneda, P. Ordejón, C. M. Sotomayor Torres, P. Gómez-Romero and E. Chávez-ngel
Mechanisms behind the enhancement of thermal properties of graphene nanofluids
Nanoscale **10**, 15402 (2018)
DOI: 10.1039/c8nr02762e
- 173.- S. Suarez-García, N. N. Adarsh, G. Molnar, A. Bousseksou, Y. García, M. M. Dirtu, J. Saiz-Poseu, R. Robles, P. Ordejón, y D. Ruiz-Molina
Spin-Crossover in an Exfoliated 2D Coordination Polymer and Its Implementation in Thermochromic Films
Applied Nanomaterials **1**, 2668 (2018)
DOI: 10.1021/acsanm.8b00341
- 174.- B. Guster, R. Robles, M. Pruneda, E. Canadell and P. Ordejón
2 × 2 charge density wave in single-layer TiTe₂
2D Mater. **6** 015027 (2019)
DOI: 10.1088/2053-1583/aaf20b
- 175.- B. Guster, C. Rubio-Verdú, R. Robles, J. Zaldívar, P. Dreher, M. Pruneda, J. A. Silva-Guillén, D.-J. Choi, J. I. Pascual, M. M. Ugeda, P. Ordejón, and R. Canadell
Coexistence of Elastic Modulations in the Charge Density Wave State of 2H-NbSe₂
Nano Letters **19**, 3027 (2019)
DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b00268
- 176.- B. Guster, M. Pruneda, P. Ordejón, E. Canadell and J. -P. Pouget
Evidence for the weak coupling scenario of the Peierls transition in the blue bronze
Phys. Rev. Materials **3**, 055001 (2019).
DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.3.055001

2.1.2. Artículos en Volúmenes de Proceedings de Conferencias y Capítulos de Libros

- 1.- P. Ordejón, E. Martínez y F. Ynduráin
Electronic Density of States features related to intermediate range order in a-Si:H.
Proc. 19th Int. Conf. Phys. Semicond., Ed. por W. Zawadzki. Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Varsovia (Polonia) 1988. pp 1661-1664.
- 2.- P. Ordejón y F. Ynduráin
Theoretical study of the electronic and vibrational structure of amorphous SiO_x.

- Proc. 20th Int. Conf. Phys. Semicond., Ed. por E.M. Anastassais y J.D. Joannopoulos. World Scientific Publishers. Londres (R.U.) 1990. pp 2147-2150.
- 3.- P. Ordejón
Frist principles theory of amorphous semiconductors: two different approaches
en “Electronic, optoelectronic and magnetic thin films”, Proc. 18th Int. School of Condensed Matter Physics, Ed. por N. Kirov y J. Marshall, Research Studies Press, Electronic Materials Series, Somerset (UK) 1995. pp 204-211.
 - 4.- S. Itoh, P. Ordejón, D. Drabold, R. M. Martin y S. Ihara
Order-N tight-binding molecular dynamics: Application to giant fullerenes.
Proc. Symposium on Dynamics and Physical Properties of Clusters, Surfaces and Interfaces, publicado en Sci. Rep. RITU **A41**, 163 (1996).
 - 5.- P. Ordejón, E. Artacho y J. M. Soler
Mixed approach to incorporate self-consistency into Order-N LCAO methods.
Proc. Symposium on Materials Theory, Simulations, and Parallel Algorithms, MRS 1995, Ed. por E. Kaxiras, J. Joannopoulos, P. Vashishta y R.K. Kalia; Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **408**, 85 (1996)
 - 6.- P. Ordejón, D. Sanchez-Portal, E. Artacho y J. M. Soler
SIESTA: DFT calculations of very large systems with LCAO basis sets.
Proc. CECAM Workshop 1997, Ed. by B. Winkler. Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Kiel (Germany) 1997. pp 45-48.
 - 7.- P. Ordejón, D. Sánchez-Portal, A. García, E. Artacho, J. Junquera y J. M. Soler
Large scale DFT calculations with SIESTA
Riken Review **29**, 42 (2000)
 - 8.- P. von Allmen, R. Ramprasad, L.R.C. Fonseca y P. Ordejón
Theory of H induced enhancement of field emission from an O covered Mo(110) surface Cold Cathodes, Vol. 2000-28 of the Proc. of the Electrochemical Society, Ed. por M. M. Cahay, K. L. Jensen, V. Kapoor, P. D. Mumford, R. A. Murphy, A. A. Talin, D. Temple y J. E. Yater. The Electrochemical Society, Phoenix (USA), 2000. pp. 16-21.
 - 9.- P. Ordejón
First Principles Electronic Structure Methods
En “Properties and Applications of Amorphous Materials”, NATO Science Series, Vol II/9, Editado por M. F. Thorpe y L. Tichý. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (Holanda), 2001. pp 189-220.
 - 10.- M. Brandbyge, K. Stokbro, J. Taylor, J.-L. Mozos y P. Ordejón
New method for first principles modeling of electronic transport through nanoelectronic devices
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **636**, D9.25.1 (2001)
 - 11.- P. Ordejón, E. Artacho, R. Cachau, J. Gale, A. García, J. Junquera, J. Kohanoff, M. Machado, D. Sánchez-Portal, J. M. Soler y R. Weht
Linear Scaling DFT Calculations with Numerical Atomic Orbitals
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **677**, AA9.6.1 (2001)
 - 12.- S. Reich, C. Thomsen y P. Ordejón
Structural and vibrational properties of single walled nanotubes under hydrostatic pressure
En Proceedings of the “XV International Winterschool on the Electronic Properties of Molecular Nanostructures”, AIP Conference Proceedings Vol. 591, ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, Springer-Berlag, Heidelberg (Alemania), 2001, pp. 388-

- 13.- J. D. Gale, V. Dura-Vila, S. Fletcher, E. Artacho, A. García, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal y J. M. Soler
First principles studies of localized defects and materials properties
 En Proceedings of the “4th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing”, ed. por S. Hanada, Z. Zhong, S. W. Nam y R. N. Wright, Japan Inst. Metals, Sendai (Japón), 2001, pp 559-562.
- 14.- J. Izquierdo, A. Vega, L. C. Balbás, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal, E. Artacho y J. M. Soler
First Principles pseudopotential calculation of the magnetic properties of low-dimensional iron systems
 Proc. 8th Int. Conf. on the Applications of DFT to Physics and Chemistry, En *Recent Advances in Density Functional Methods, Part III*, ed. por V. Barone, A. Bencini y P. Fantucci (World Scientific, Singapore, 2002), pp 205-223.
- 15.- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo y P. Ordejón
First principles studies of N and P dopant interactions in SiC: implications for co-doping
 Proc. International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2001, Ed. por S. Yoshida, S. Nishino, H. Harima y T. Kimoto, publicado en Material Science Forum, **433-434**, 649 (2002).
- 16.- P. Deák, A. Gali, Z. Hajnal, T. Frauenheim, N. T. Son, E. Janzen, W. J. Choyke y P. Ordejón
A cause for SiC/SiO₂ interface states: The site selection of oxygen in SiC
 Proc. International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2001, Ed. por S. Yoshida, S. Nishino, H. Harima y T. Kimoto, publicado en Materials Science Forum, **433-434**, 535 (2002).
- 17.- S. K. Estreicher, D. West y P. Ordejón
Copper-defect and copper-impurity interactions in Silicon
 Proc. 9th International Autumn Meeting on Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology, Ed. por V. Raineri, F. Priolo, M. Kittler y Richter, publicado en Sol. St. Phenom. **82-84**, 341 (2002)
- 18.- J. Junquera y P. Ordejón
Ab-initio calculations on the structural and electronic properties of BaO/BaTiO₃ and SrO/SrTiO₃ interfaces
 En “Atomistic Aspects of Epitaxial Growth”, NATO Science Series, ed. por M. Kotrla, N. I. Papanicolau, D. D. Vvedensky y L. T. Wille, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (Holanda), 2002, pp. 561-571.
- 19.- M. Machón, S. Reich, J. Maultzsch, P. M. Rafailov, C. Thomsen, D. Sánchez-Portal y P. Ordejón
Optical properties of 4 Å-diameter single-wall nanotubes
 En “Structural and Electronic Properties of Molecular Nanostructures”, Proceedings de la XVI International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, AIP Conference Proceedings Vol. 633, ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, Springer-Berlag, Heidelberg (Alemania), 2002, pp. 275-278.
- 20.- S. Reich, C. Thomsen, P. Ordejón y D. Sánchez-Portal
Band structure and optical properties of isolated and bundled nanotubes
 En “Structural and Electronic Properties of Molecular Nanostructures”, Proceedings de la XVI International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, AIP Con-

- ference Proceedings Vol. 633, ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, Springer-Berlag, Heidelberg (Alemania), 2002, pp. 357-360.
- 21.- J. Maultzsch, S. Reich, P. Ordejon, R.R. Bacsa, W. Bacsa, E. Dobardzic, M. Damnjanovic y C.Thomsen,
Vibrational properties of double-walled carbon nanotubes
Proc. 17th International Winterschool/Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials, Ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, publicado en AIP Conference Proceedings **685**, 324 (2003).
- 22.- S. Reich, P. Ordejon, R. Wirth, J. Maultzsch, B. Wunder, H. J. Muller, C. Lathe, F. Schilling, U. Dettlaff-Weglikowska, S. Roth y C. Thomsen
Hexagonal diamond from single-walled carbon nanotubes
Proc. 17th International Winterschool/Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials, Ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, publicado en AIP Conference Proceedings **685**, 324 (2003).
- 23.- E. Hernandez, P. Ordejón, E. Canadell, J. Junquera y J. M. Soler
Molecular dynamics simulations of nanotube growth
Proceedings of NATO Advanced Research Workshop on Dynamic Interactions in Quantum Dot Systems, Puszczykowo, Polonia, 2002. En: *Low-dimensional systems: Theory, preparation, and some applications*, NATO Science Series, Series II: Mathematics, Physics and Chemistry 91, ed. por L. M. Liz-Marzan y M. Giersig (Kluwer, Dordrecht, 2003) pp. 45-56.
- 24.- J.L. Mozos, R. Rurali, G. Canto, E. Canadell, P. Ordejón y E. Hernández
Recent applications of simulation techniques in materials science and nanotechnology
Recent Res. Devel. Applied Phys. **5**, 557 (2002).
- 25.- A. Figueras, I. Justicia, G. Canto, J.-L. Mozos, P. Ordejón, R. Gerbasi y G. A. Battiston
Photocatalytic CVD coatings: state-of-the art and prospects for industrial applications
Proceedings of CIMTEC-2002: 10th International Ceramics Congress and 3rd Forum of New Materials, ed. por P. Vincenzini (Techna Publishers, Faenza, Italia 2003) pp. 307-318
- 26.- J.L. Mozos, P. Ordejón, M. Brandbyge, J. Taylor y K. Stokbro
Density functional theory calculations of quantum electron transport: carbon nanotubes-gold contacts
Advances in Quantum Chemistry **42**, 299 (2003)
- 27.- K. Stokbro, J. Taylor, M. Brandbyge y P. Ordejón
TranSiesta: a spice for molecular electronics
Proc. of the Sixth United Engineers Found Conference on Molecular Electronics, Science and Technology, Key West, Florida, December 2002. En: *Molecular Electronics III*, Annals of the New York Academy of Sciences **1006**, (2003), ed. por J. R. Reimers, C. A. Picconatto, J. C. Ellenbogen y R. Shashidhar (New York Academy of Sciences, New York, 2003) pp 212-226
- 28.- K. Stokbro, M. Brandbyge, J. Taylor y P. Ordejón
TranSiesta: A SPICE for molecular electronics
Proc. Nanotechnology Conference and Trade Show (Nanotech 2003), San Francisco, CA, Feb. 2003, Ed. por M. Laudon y B. Romanowicz, publicado en NANOTECH 2003, **2**, 82 (2003).
- 29.- J.L. Mozos, P. Ordejón, M. Brandbyge, J. Taylor y K. Stokbro
Density functional theory calculations of quantum electron transport: carbon nanotubes-

- gold contacts*
 Proc. 3rd International Workshop on DV-Xa/14th Annual Meeting on DV-Xa, Ed. por P.O. Lowdin, J.R. Sabiny E. Brandas, publicado en *Advances in Quantum Chemistry* **42**, 299 (2003)
- 30.- M. Machón, S. Reich, J. M. Pruneda, C. Thomsen, y P. Ordejón
Ab-initio studies of electron-phonon coupling in single-walled i nanotubes
 En “Molecular Nanostructures”, Proceedings de la XVII International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, AIP Conference Proceedings Vol. 685, ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, AIP, Melville (USA), 2003, pp. 427-430.
- 31.- A. Gali, P. Deák, E. Rauls, P. Ordejón, F.H.C. Carlsson, I.G. Ivanov, N.T. Son, E. Janzen y W.J. Choyke
Antisites as possible origin of irradiation induced photoluminescence centers in SiC: A theoretical study on clusters of antisites and carbon interstitials in 4H-SiC
 Procs. 10th International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2003, Ed. por R. Madar y J. Camassel, en “Silicon Carbide and Related Materials 2003, parts 1 and 2”, publicado en *Materials Science Forum*, **457-460**, 443 (2004).
- 32.- R. Rurali, E. Wachowicz, P. Ordejón, P. Godignon, J. Rebollo y P. Hyldgaard
First-principles study of O adsorption at SiC surface
 Procs. 10th International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2003, Ed. por R. Madar y J. Camassel, en “Silicon Carbide and Related Materials 2003, parts 1 and 2”, publicado en *Materials Science Forum*, **457-460**, 1293 (2004).
- 33.- R. Rurali, E. Hernández, P. Godignon, J. Rebollo y P. Ordejón
Self-passivation mechanisms in clusters of N dopants in SiC
 Proc. E-MRS 2003 Fall Meeting, Ed. por M. Godlewski y J. Kossut, publicado en *physica status solidi (c)*, **1**, 274 (2004)
- 34.- D. Sánchez-Portal, P. Ordejón y E. Canadell
Computing the properties of materials from First Principles with Siesta
 “Principles and Applications of Density in Inorganic Chemistry II”, Book series: Structure and Bonding **113**, 103 (2004)
- 35.- M. Machon, S. Reich, J. Maultzsch, P. Ordejon y C. Thomsen(Thomsen, C)
The strength of the radial-breathing mode in single-walled carbon nanotubes
 Proc. 18th International Winterschool/Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials, Ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, publicado en *AIP Conference Proceedings* **723**, 381 (2004).
- 36.- J. Maultzsch, S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt, y P. Ordejon
Phonon dispersion of graphite
 Proc. 18th International Winterschool/Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials, Ed. por H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring y S. Roth, publicado en *AIP Conference Proceedings* **723**, 397 (2004).
- 37.- M. Cobian, E. Machado, M. Kaczmarek, B. Braida, P. Ordejón, D. Garg, J. Norman y H. Cheng
Simulation of the Growth of copper films for micro and nano-electronics
 En: *Advances in Science and Technology* **51**, 167 (2006)
 Proceedings of the International Symposium “Disclosing Materials at the Nanoscale” of CIMTEC 2006 - 11th International Ceramics Congress and 4th Forum on New Materials, ed. por P. Vincenzini and G. Marletta (Trans Tech Publications, Inc., Faenza, Italy 2006)

- 38.- E.R. Hernandez, A. Antonelli, L. Colombo y P. Ordejón
The calculation of free-energies in semiconductors: Defects, transitions and phase diagrams
 ‘Theory and Defects in Semiconductors’, Book series: Topics in Applied Physics **104**, 115 (2007)
- 39.- C. Brun, E. Machado-Charry, P. Ordejon, E. Canadell yZ. Z. Wang
Inhomogenities of the CDW vector at the (-201) surface of the Quasi-1D blue bronze $Rb_{0.3}MoO_3$
 Proc. International Conference on Nanoscience and Technology 2006, Ed. por E. Meyer, M. Hegner, C. Gerbery H. J. Guntherodt, publicado en Journal of Physics Conference Series **61**, 140 (2007)
 DOI: 10.1088/1742-6596/61/1/029

2.2. PATENTES CONCECIDAS

1. Título: "Methods for depositing metal i films on diffusion barrier layers by CVD or ALD processes"
 Autores: D. Garg, H. Cheng, J. A. T. Norman, E. Machado y P. Ordejón
 Número de Patente: 7311946
 Fecha de Concesión: 25 de Diciembre de 2007
 País: Estados Unidos
 Entidad Titular: Air Products and Chemicals, INC.
2. Título: "Method for depositing metal films by CVD on diffusion barrier layers"
 Autores: D. Garg, H. Cheng, J. A. T. Norman y P. Ordejón
 Número de Patente: EP1953809 (A2)
 Fecha de Solicitud: 23 de Junio de 2004
 Países: Unión Europea
 Entidad Titular: Air Products and Chemicals, INC.
3. Título: "Deposition of Metal Films on Diffusion Layers by Atomic Layer Deposition and Organometallic Precursor Complexes Therefor"
 Autores: D. Garg, H. Cheng, P. Ordejón and M. Cobian
 Número de Solicitud: 07106 USA
 Países: USA, Taiwan, China
 Entidad Titular: Air Products and Chemicals, INC.
4. Título: "Diffusion barrier layers and processes for depositing metal films thereupon by CVD or ALD processes"
 Autores: D. Garg, H. Cheng, J.A.T. Norman, E. Machado and P. Ordejón
 Número de Patente: 7524533 USA
 Fecha de Concesión: 28 de Abril de 2009
 Países: USA
 Entidad Titular: Air Products and Chemicals, INC.

3. ACTIVIDAD CIENTÍFICA

3.1. PUESTOS DESEMPEÑADOS CON ANTERIORIDAD

1990-1992

Profesor Ayudante LRU

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid.

1992-1994

Visiting Scientist.

Department of Physics, University of Illinois, Urbana, Illinois (USA)

1994-1995

Post Doctoral Research Associate.

Department of Physics y Materials Research Laboratory, University of Illinois, Urbana, Illinois (USA)

1995-1999

Profesor Asociado Tipo 3.

Universidad de Oviedo (Facultad de Ciencias).

Abril 1999 - Mayo 2003

Científico Titular del CSIC,

Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB), CSIC.

15 Junio-15 Septiembre 2002

Investigador Asociado (Chargé de Recherche Associé)

Centre National de la Recherche Scientifique - Département de Physique des Matériaux, Université Claude Bernard de Lyon (Francia)

Mayo 2003 - Mayo 2005

Investigador Científico del CSIC,

Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB), CSIC.

1 Septiembre - 30 Noviembre 2003

Visiting Researcher

Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens Ohio (USA)

1 - 30 Noviembre 2004

Visiting Professor

Universidad Paul Sabatier de Toulouse (Francia)

1 - 31 Julio 2005

Visiting Professor

Donostia International Physics Centre

Junio 2005 - Septiembre 2007

Profesor de Investigación del CSIC,

Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB), CSIC.

3.2. PREMIOS Y DISTINCIONES

2018

Medalla “Narcís Monturiol” al Mérito Científico y Tecnológico de la Generalitat de Catalunya.

2017

Miembro de la Academia Europaea

2005

Fellow de la American Physical Society por "*Contributions to first-principles electronic structure methods and the development, dissemination and application of efficient tools for atomistic simulations in complex materials*". Nominado por la División de Física de Materiales de la APS.

2003

Placa de Honor de la Asociación Española de Científicos, por aportaciones científicas y técnicas en Ciencia de Materiales.

3.3. PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS SUBVENCIONADOS

1988-1990

Investigador en el Proyecto "Estudio de impurezas y defectos en semiconductores covalentes", CICyT (PB86-0559).

Investigador Principal: Dr. Emilio Martínez Gutierrez (U.A.M.)

1989-1992

Investigador en el Proyecto "Estudios *ab initio* de la oxidación y deposición de metales en superficies semiconductoras". DGICYT (PB89-0157).

Investigador Principal: Prof. Dr. Felix Ynduráin Muñoz (U.A.M.)

1989-1992

Investigador en el Proyecto "DESON", ESPRIT Basic Research Action N.3247. de la Comunidad Económica Europea

Coordinador: Dr. Yves Cros (LEPES CNRS, Grenoble, Francia).

1992-1994

Investigador en el Proyecto "Computational Theory of the Electronic Structure of Materials". NSF (USA) (No. DMR-89-20539)

Investigador Principal: Prof. Richard M. Martin (University of Illinois)

1992-1995

Investigador en el Proyecto "Theory of Solids, Surfaces and Heterostructures". DOE (USA) (No. DEFG 02-91ER45439)

Investigador Principal: Prof. Richard M. Martin (University of Illinois)

1994-1995

Investigador en el Proyecto "Theory of Surfaces and Interfaces". DOE (USA) (No. DEFG 02-91ER45439)

Investigador Principal: Prof. J. B. Adams (University of Illinois)

1996-1999

Investigador en el Proyecto "Nuevos métodos ab-initio para el cálculo de propiedades físicas en sistemas de gran tamaño. Aplicaciones estratégicas en semiconductores, superficies y macromoléculas biológicas" DGICYT (PB96-0202).

Investigador Principal: Prof. Jose M. Soler (U.A.M.)

2000-2001

Investigador Principal de la Acción Integrada con Alemania: "Propiedades Electrónicas

y Vibracionales de Estructuras Semiconductoras de Monocapas Tensionadas de InAs en GaAs” MEC (HA1999-0118).

Investigador Principal: Dr. Pablo Ordejón (parte española), Prof. Christian Thomsen (parte alemana).

2000-2002

Investigador Principal del Proyecto: “Self-Assembly with Carbon Nanotubes: Towards Devices for Information Processing” European Union (IST-1999-10593).

Investigador Principal: Dr. Pablo Ordejón (parte española), Dr. Jean-Noel Patillon (Coordinador del Proyecto).

2000-2003

Investigador en el Proyecto “Metodología ab-initio de Orden-N y simulaciones mecano-cúnticas realistas en sistemas complejos en Física de Materiales, Geofísica, Química y Biología Molecular” Fundación Ramón Areces.

Investigador Principal: Prof. Jose M. Soler (U.A.M.)

2001-2002

Investigador Principal en el Proyecto Conjunto de Investigación Científico-Técnica con Bélgica: “Estudio computacional de las propiedades y transiciones estructurales en materiales ferroelectricos”

Ministerio de Asuntos Exteriores (2000BE0004)

Investigador Principal: Dr. Pablo Ordejón (parte española), Dr. Philippe Ghosez (parte belga).

2001-2003

Investigador Principal y Coordinador en el Proyecto Coordinado: “Aplicación de Métodos *ab-initio* de Orden-N: Simulaciones mecano-cuánticas realistas de sistemas complejos en Física de Materiales, Química de Estado Sólido y Biomoléculas”

Ministerio de Ciencia y Tecnología, Plan General del Conocimiento (BFM2000-1312-C02)

Investigador Principal: Pablo Ordejón

Coordinador: Pablo Ordejón

2001-2002

Investigador Principal de la Acción Integrada con Francia: “Estructura y reactividad química de moléculas biológicas” MCyT (HF2000-0142).

Investigador Principal: P. Ordejón (parte española), Prof. Karel Kunc (parte francesa).

2002-2003

Investigador Principal en el Proyecto Conjunto de Investigación del Convenio CSIC/CONICET: “Estudio teórico de nuevos materiales”, CSIC/CONICET (2002RAR0003)

Investigador Principal: Dr. Pablo Ordejón (parte española), Prof. Mariana Weissmann (parte argentina).

2002-2003

Investigador Principal de la Acción Especial: “Simulación de dispositivos basados en nanotubos de carbono: crecimiento, interacción con superficies, moléculas y contactos metálicos, y transporte electrónico” MCyT (MAT2001-4341-E).

2004-2005

Investigador en el Proyecto Coordinado: “Producción de H₂ por descomposición de agua mediante fotocatalizadores activados por luz visible”

Proyecto Intramural de Frontera, CSIC (200460F0231)

Investigador Principal: Albert Figueras Daga

2004-2006

Investigador Principal y Coordinador en el Proyecto Coordinado: “Desarrollo y Aplicación de Métodos Eficientes de Simulación Mecano-Cuántica en Materiales Complejos, Nanoestructuras y Biomoléculas”

Min. de Ciencia y Tecnología, Plan General del Conocimiento (BFM2003-03372-C03)

Investigador Principal: Pablo Ordejón

Coordinador: Pablo Ordejón

2005-2008

Coordinador del Proyecto Marie Curie “First Principles studies of the field-induced tunability of dielectric properties”

EU Marie Curie Outgoing Fellowships (MOIF-CT-2005-008534)

2006-2008

Investigador en la Acción “Laboratorio de Estructura Electrónica de Materiales - ICMAB-CSIC”

Generalitat de Catalunya, convocatoria de Suport als Grups de Recerca de Catalunya (SGR-2005 683)

Investigador Principal: Enric Canadell

2006-2009

Investigador Principal y Coordinador en el Proyecto Coordinado: “Simulaciones mecanocuánticas y microscopía de proximidad en problemas actuales de superficies, materiales complejos, biomoléculas y nanoestructuras”

Ministerio de Educación y Ciencia, Plan Nacional de Física (FIS2006-12117-C04-01)

Coordinador: Pablo Ordejón

Investigador Principal: Pablo Ordejón

2006-2009

Investigador en el Proyecto STREP MaCoMuFi: “Manipulate the Coupling in Multifunctional Thin Films”

(EU-FP6 STREP-FP6-03321) Comisión Europea

Coordinador: Wilfrid Prellier (CNRS, Francia)

Investigador Principal nodo ICMAB-CSIC: Josep Fontcuberta

2007-2008

Investigador en el Proyecto PIF (PIF06-037) del CSIC: “Sistemas nanoelectrónicos basados en nanohilos de Silicio”

Coordinador: Alvaro Sanpaulo, Centro Nacional de Microelectrónica

Investigador Principal nodo ICMAB: Pablo Ordejón

2007-2011

Investigador en el Proyecto CONSOLIDER: “Supercomputación y e-Ciencia” (ref. CSD2007-00050)

Coordinador: Mateo Valero, Centro Nacional de Supercomputacion

2010-2012

Investigador Principal y Coordinador en el Proyecto Coordinado: “Desarrollo y aplicación de métodos de simulación mecano-cuánticos en nanociencia”

Min. de Ciencia e Innovación, Plan Nacional de Física (FIS2009-12721-C04)

Investigador Principal: Pablo Ordejón

Coordinador: Pablo Ordejón

2010-2012

Investigador en el Proyecto: Large-scale integrated project (IP) FET “Atomic scale and

single molecule logic gate technologies” (ATMOL)
Comunidad Europea FP7-ICT-2009-6
Investigador Principal: Nicolás Lorente Palacios
Coordinador: C. Joachim (CEMES-Toulouse, Francia)

2013-2015

Investigador Principal en el Proyecto Coordinado: “Simulaciones atomísticas de primeros principios: metodología y aplicaciones a sistemas complejos”
Ministerio de Economía y Competitividad (FIS2012-37549-C05-02)
Investigador Principal: Pablo Ordejón
Coordinador: Emilio Artacho

2014-2018

Director del Programa de Centros de Excelencia Severo Ochoa del ICN2 “Nanodispositivos para Retos Sociales”
Ministerio de Economía y Competitividad (SEV-2013-0295)
Investigador Principal: Pablo Ordejón
Financiado con 4 Millones de Euros

2016-2018

Investigador Principal en el Proyecto Coordinado: “Siesta y la Teoría de Inestabilidades y Transporte en Materiales Funcionales y de Baja Dimensionalidad” Ministerio de Economía y Competitividad (FIS2015-64886-C5-3-P)
Investigador Principal: Jose Miguel Alonso Prunedá y Pablo Ordejón
Coordinador: Emilio Artacho

2015-2018

Investigador Principal en el proyecto: “Nanoscience Foundries for Fine Analysis - Europe” (NFFA-Europe).
Unión Europea H2020-INFRAIA-2014-2015, proyecto no. 654360
Web page: <http://www.nffa.eu/>
Coordinador: Giorgio Rossi, CNR (Italy)
Financiación para el grupo ICN2: 250.000 Euros

2015-2017

Investigador Principal en el proyecto: “Materials Design at the eXascale” (MAX) Center of Excellence
Unión Europea Call: H2020-EINFRA-2015-1, proyecto no. 676598
Web page: <http://www.max-center.eu/>
Coordinador: Elisa Molinari CNR (Italy)
Financiación para el grupo ICN2: 540.600 Euros

2018-2020

Investigador Principal en la Acción “Grup d’Estructura Electrònica de Materials” Generalitat de Catalunya, convocatoria de Suport als Grups de Recerca de Catalunya (2017 SGR 1506)
Financiación: 36.000 Euros

2018-2022

Director del Programa de Centros de Excelencia Severo Ochoa del ICN2
Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, (SEV-2017-0706)
Investigador Principal: Pablo Ordejón
Financiado con 4 Millones de Euros

2018-2021

Investigador Principal en el proyecto: “Materials Design at the eXascale” (MAX) Center of Excellence

Unión Europea Call: H2020-INFRAEDI-2018-1., proyecto no. 824143

Web page: <http://www.max-center.eu/>

Coordinador: Elisa Molinari CNR (Italy)

Financiación para el grupo ICN2: 950.000 Euros

2019-2021

Investigador Principal en el proyecto: “Interoperable Material-to-Device simulation box for disruptive electronics” - INTERSECT. Modelling synaptic electronics and neuromorphic computing.

Unión Europea Call: H2020-NMBP-TO-IND-2018-2020, proyecto no. 814487

Web page: <http://intersect-project.eu/>

Coordinador: Arrigo Calzolari CNR (Italy)

Financiación para el grupo ICN2: 556.000 Euros

3.4. CONTRATOS Y SUBVENCIONES DE EMPRESAS

1997-1998

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).

Título: “Development of new calculation techniques for Electronic Structure”

Importe total: 1.000.000 Yenes

1997-1999

Investigador Principal de un contrato entre Motorola (Phoenix Corporate Research Laboratories, USA) y la Universidad de Oviedo.

Título: “Developing accurate *ab-initio* atomistic simulation tools for large scale materials simulations”

Importe total: 45.000 US\$

1999-2000

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).

Título: “Development of new calculation techniques for Electronic Structure”

Importe total: 1.000.000 Yenes

1999-2000

Investigador Principal de un contrato entre Motorola (Phoenix Corporate Research Laboratories, USA) y el ICMAB.

Título: “Ab-Initio Studies of the Properties of Epitaxial Oxides on Silicon”

Importe total: 33.320 US\$

2000-2001

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).

Título: “Development of new calculation techniques for Electronic Structure”

Importe total: 1.000.000 Yenes

2000-2001

Investigador Principal de un contrato entre Carburos Metálicos y el ICMAB.

Título: “Ab-initio study of hydrogen storage in carbon materials”

Importe total: 50.000 US\$

2001-2002

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2001-2002

Investigador Principal de un contrato entre Air Products and Chemicals Co. (USA) y el ICMAB.
Título: "Structure and reactivity of passivated metal and metal nitride surfaces for CVD copper deposition: Computational modeling based on ab-initio DFT"
Importe total: 42.000 US\$

2002-2003

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2002-2003

Investigador Principal de un contrato entre Air Products and Chemicals Co. (USA) y el ICMAB.
Título: "Structure and reactivity of passivated metal and metal nitride surfaces for CVD copper deposition: Computational modeling based on ab-initio DFT"
Importe total: 34.500 US\$

2003-2004

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2004

Investigador Principal de un contrato entre Air Products and Chemicals Co. (USA) y el ICMAB.
Título: "Materials Design and Process for Improved Copper Adhesion on Diffusion Barrier Layers via Atomic layer Deposition"
Importe total: 30.000 US\$

Oct. 2004 - Sept. 2005

Investigador Principal de un contrato entre Air Products and Chemicals Co. (USA) y el ICMAB.
Título: "Materials Design and Process for Improved Copper Adhesion on Diffusion Barrier Layers via Atomic layer Deposition"
Importe total: 39.000 Euros.

Oct. 2005 - Sept. 2006

Investigador Principal de un contrato entre Air Products and Chemicals Co. (USA) y el ICMAB.
Título: "Materials Design and Process for Improved Copper Adhesion on Diffusion Barrier Layers via Atomic layer Deposition"
Importe total: 49.000 Euros.

2007-2008

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2008-2009

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2009-2010

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2010-2011

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

2011-2012

Investigador Principal en la Subvención de Sumitomo Chemical (Japón).
Título: "Development of new calculation techniques for Electronic Structure"
Importe total: 1.000.000 Yenes

3.5. DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES

- 1.- Javier Junquera Quintana, Universidad Autónoma de Madrid, Junio 2001
Cálculos ab-initio de propiedades electrónicas y estructurales de interfases de siluros y titanatos.
Calificación: Apto - Cum Laude.
Co-directores: P. Ordejón y E. Artacho.
- 2.- Stephanie Reich, Technische Universität Berlin, Diciembre 2001
Carbon nanotubes: vibrational and electronic properties
Co-directores: Christian Thomsen y P. Ordejón.
- 3.- José Miguel Alonso Pruneda, Universidad de Oviedo, Febrero 2002
Propiedades vibracionales y magnéticas en la Teoría del Funcional de la Densidad.
Calificación: Apto - Cum Laude.
Co-directores: P. Ordejón y J. Ferrer.
- 4.- Eduardo Machado Charry, Universidad Autónoma de Barcelona, Noviembre 2007
First Principles Calculations of Surfaces and Layered Materials
Calificación: Sobresaliente - Cum Laude.
Co-directores: P. Ordejón y E. Canadell.
- 5.- Sandra García Gil, Universidad Autónoma de Barcelona, Abril 2011
Theoretical characterization of metallic and semiconducting nanostructures by means of DFT using localized basis sets
Calificación: Sobresaliente - Cum Laude.
Director: P. Ordejón.
- 6.- Miguel Angel Perez Osorio, Universidad Autónoma de Barcelona, 22 Enero 2013
Development and application of ab initio methods for the study of electronic excitations in molecules and extended solids: GW approximation and constrained DFT
Calificación: Apto Cum Laude
Directores: P. Ordejón y J. M. Alonso Pruneda

- 7.- Jose Angel Silva Guillén, Universidad Autónoma de Barcelona, 1 Julio 2015
Estudio terico de las propiedades electrnicas de materiales 2D
Calificación: Apto Cum Laude
Directores: P. Ordejón y Enric Canadell
- 8.- Desanka Boskovic, Universidad Autónoma de Barcelona, 10 Julio 2017
Electronic properties of organic semiconductors and low-dimensional materials
Calificación: Notable
Director: P. Ordejón

3.6. ORGANIZACIÓN DE CONGRESOS

Julio 1998

Organizador Principal del Workshop “Local Orbital Methods for Large Scale Materials Simulations”

Workshop del CECAM (Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular), Lyon, Francia.

Enero 2000

Organizador del International Workshop on “Computational Materials Science: Electronic Structure Theory and Simulations”.

Miraflores de la Sierra, Madrid.

Junio 2000

Organizador del Workshop “Electronic and Optical Properties of Semiconducting Glasses”

Workshop del CECAM (Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular), Lyon, Francia.

Noviembre 2000

Organizador (Chairman) del Workshop “Modelling of the Growth and Interface properties of thin films and multilayers through Molecular Dynamics”

Barcelona.

Febrero 2001

Organizador del Workshop “Nanoelectronics for Information Devices”, 7th MELARI-NID,

Workshop del Programa “Information Society Technologies” de la Unión Europea.

Barcelona.

Diciembre 2006

Organizador del Workshop “Quantum Transport and non-adiabatic electron evolution from first principles approaches”

Workshop del CECAM (Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular), Lyon, Francia.

Enero 2007

Organizador del Workshop “13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods”

Workshop del ICTP, Trieste, Italia.

Abril 2011

Organizador del Workshop “Charge and spin transport in chemically modified graphene-based materials”

Workshop del CECAM (Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular), Barcelona, España.

Enero 2012

Chairman del Workshop “MINI2012: Computational Condensed Matter Physics, Materials Science and Nanoscience from First Principles”

<http://www.max-centre.eu/max-hackathon/>

Barcelona, España.

Julio 2018

Organizador del “MaX Hackathon 2018”

Barcelona, España.

3.7. ESTANCIAS EN CENTROS OTROS CENTROS NACIONALES Y EXTRANJEROS (NO INFERIORES A UNA SEMANA)

Marzo 1991

LEPES, CNRS, Grenoble (Francia). Invitado por el Dr. Yves Cros. (Una semana).

Junio-Julio 1991

Max Planck Institute für Festkörperforschung, Stuttgart (RFA). (Dos meses).

Octubre 1992-Septiembre 1995

Department of Physics, University of Illinois, Urbana, Il (USA). (Tres años).

Octubre 1994

Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens, Oh (USA). Invitado por el Prof. David Drabold. (Una semana).

Noviembre 1994

Department of Physics, Arizona State University, Phoenix, Az (USA). Invitado por el Prof. Otto Sankey. (Una semana).

Junio 1995

Departamento de Física, Universidad Técnica de Chemnitz, Chemnitz (RFA). Invitado por el Prof. Thomas Frauenheim. (Un mes).

Marzo 1996

Department of Physics, University of Illinois, Urbana, Il (USA). (Una semana).

Octubre 1997

Motorola Phoenix Research Laboratories, Phoenix, Arizona (USA). (Una semana).

Septiembre 1998

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F. (México). (Una semana).

Julio 2000

Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin, Berlin (Alemania). (Una semana).

Abril 2001

Department of Physics, Texas Tech, Lubbock, Texas (USA) (Una semana).

Julio 2001

Laboratoire d'Optique des Solides, Université Pierre et Marie Curie, París (Francia). (Dos semanas).

Diciembre 2001

Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin, Berlin (Alemania). (Una semana).

Junio 2002

Départament de Physique des Matériaux, Université Claude Bernard de Lyon (Francia). (Una semana)

Julio 2002

Départament de Physique des Matériaux, Université Claude Bernard de Lyon (Francia). (Dos semanas)

Septiembre 2002

Départament de Physique des Matériaux, Université Claude Bernard de Lyon (Francia). (Una semana)

Junio-Julio 2003

Départament de Physique des Matériaux, Université Claude Bernard de Lyon (Francia). (Dos meses)

Septiembre-Noviembre 2003

Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens, Ohio (USA). (Tres meses)

Noviembre 2004

Laboratoire Collisions, Agrégats, Réactivité, IRSAMC Université Paul Sabatier, Toulouse (Francia) (Un mes)

Julio 2005

Donostia International Physics Center (Un mes)

3.8. CONFERENCIAS INVITADAS EN CONGRESOS

Congresos Internacionales

Marzo, 1994

March Meeting of the APS. Pittsburgh (USA)

“Unconstrained minimization approach for electronic computations which scales linearly with system size”

Septiembre, 1994

8th International School on Condensed Matter Physics. Varna (Bulgaria)

“Frist principles theory of amorphous semiconductors: two different approaches”

Mayo, 1995

International Workshop on “Electronic Structure Methods”. St. Mary’s College, Maryland (USA)

“Linear scaling methods: the path towards quantum simulations in very large systems”

Julio, 1995

International Workshop on “Order-N Methods”. CECAM, Lyon (Francia)
 “Towards self-consistent LDA with linear scaling: an LCAO approach”

Julio 1996
 International Workshop on “Ab-Initio phonons”. CECAM, Lyon (Francia)
 “Linear scaling approach for the computation of phonons from electronic structure”

Septiembre 1996
 Order-N Symposium of the International Psi-K Network Conference. Schwaebisch Gmuend (Alemania)
 “Selfconsistent LDA with Order-N scaling”

Enero 1997. 8th International Workshop on “Computational Condensed Matter Physics: Total Energy and Forces Methods”. ICTP, Trieste (Italia)
 “Order-N Density Functional Theory”

Febrero 1997. International Workshop on “Nanotubes for Microstructure Technology”. Valladolid (España)
 “Large Scale O(N) Methods”

Junio 1997
 International Workshop on “How can ab-initio calculations be an effective tool for the study of mineral properties?”. CECAM, Lyon (Francia)
 “SIESTA: DFT calculations of very large systems with LCAO basis sets”

Septiembre 1997
 International Materials Research Congress-97, Cancún (Mexico)
 “Order-N LDA and GGA calculations: Opening first principles to thousands of atoms: DNA and nanoscale systems”

Enero 1998
 International Workshop on Large-Scale Quantum Simulations: Total Energy and Force Methods”. Tsukuba (Japón).
 “Large-scale DFT calculations with linear scaling: LCAO approach”

Marzo 1998
 March Meeting of the APS. Los Angeles (USA)
 “Density Functional O(N) Calculations”

Mayo 1999
 Molecular Simulation’99. Conferencia Virtual (<http://molsim.vei.co.uk>)
 “DFT Calculations with Linear Scaling: the SIESTA Approach”

Septiembre 1999
 International Materials Research Congress-99, Cancún (Mexico)
 “Linear Scaling DFT Calculations For Large Systems”

Noviembre 1999
 RIKEN Symposium: “Large scale calculation of electronic states: Exploring dynamical properties of materials”. RIKEN, Wakoshi (Japón).
 “Large Scale DFT Calculations with SIESTA”

Junio 2000
 CECAM Workshop on “Electronic and Optical Properties of Semiconducting Glasses”. CECAM, Lyon (Francia).
 “Review of first-principles electronic structure calculations”

Agosto 2000
 International Psi-K 2000 Network Conference. Schwaebisch Gmuend (Alemania)
 “Numerical-atomic-orbitals DFT for large systems: applications of SIESTA”

Marzo 2001

SANSYMOC-I Workshop. Estrasburgo (Francia)
“Linear scaling DFT calculations with atomic orbitals”

Abril 2001

General Meeting of the American Chemical Society. San Diego (USA)
“Linear scaling DFT calculations with numerical atomic orbitals”

Abril 2001

Spring Meeting of the Materials Research Society. San Francisco (USA)
“Linear scaling DFT calculations with numerical atomic orbitals”

Agosto 2001

International Workshop on the DV-Xa Method. RIKEN (Japón)
“First principles DFT calculations of electronic transport in molecular and nano-scale devices”

Septiembre 2001

CECAM Workshop on “Local orbitals and Linear Scaling ab-initio Calculations”. Lyon (Francia)
“Introduction to local orbitals and linear-scaling ab initio calculations”

Marzo 2002

II^{ème} Rencontre Franco-Espagnole sur la Chimie et la Physique de l'état Solide. Sant Feliu de Guixols, Girona (España)
“Simulations in Complex Materials from First Principles”

Septiembre 2002

IX International Nicolás Cabrera Summer School on Frontiers in Science and Technology: “Molecular Electronics”. Miraflores de la Sierra, Madrid (España)
“DFT method for non-equilibrium transport”

Septiembre 2003

5th International Symposium on “Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets” - ISCOM 2003, Port-Bourgenay (Francia)
“Properties of Crystalline Molecular Solids from Density Functional Theory”

Noviembre 2003

Ramón Areces International Symposium on “New Trends in Fundamental Materials Science Research”, Barcelona (España)
“The role of simulation in modern materials science”

Septiembre 2004

European Materials Research Society, 2004-Fall Meeting, Varsovia (Polonia)
“Using local orbitals to compute the properties of materials”

Octubre 2004

Workshop sobre “Convergences Bio-Nano-Info technologies” de la Academia des Technologies de Francia y la Real Academia de Ingenieria de España.
“Simulaciones en el Nanomundo: del ADN a los Nanotubos”

Noviembre 2004

7th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Taipei (Taiwan)
“Using local orbitals to compute the properties of materials from first principles”

Junio 2005

CECAM Workshop on “State of the art, developements and perspective of real space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics”, Lyon (France)
“Electronic transport in nanostructures from first principles”

Junio 2005

CECAM Workshop on “State of the art, developements and perspective of real space electronic structure techniques in condensed matter and molecular physics”, Lyon (France)
“Introduction: a bit of history on previous CECAM workshops”

Agosto 2005

“Trends in Nanotechnology 2005”, Oviedo (España)
“Electronic transport in nanostructures from first principles”

Enero 2007

Workshop on “Computational and Modelling Methods and Applications”, King Abdulaziz City for Science and Technology, Riyadh (Arabia Saudi)
“Understanding electronic transport in the nanoscale”

Enero 2007

Workshop on “Computational and Modelling Methods and Applications”, King Abdulaziz City for Science and Technology, Riyadh (Arabia Saudi)
“Simulation of STM images: adsorbates, CDW’s and Inelastic Spectroscopy”

Enero 2007

Workshop on “Computational and Modelling Methods and Applications”, King Abdulaziz City for Science and Technology, Riyadh (Arabia Saudi)
“The role of simulation in modern materials science”

Marzo 2007

Symposium on Surface Science 2007, Les Arcs (Francia)
“Analysis of the STM images of the CDW phase in quasi-1D Rb_{0.3}MoO₃”

Julio 2007

XII International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries, Barcelona (España)
“First Principles Studies of Metal-Ferroelectric Tunnel Junctions”

Agosto 2007

XII International Conference on the Applications of Density Functional Theory, Amsterdam (Holanda)
“Quantum transport from NEGF-DFT: Fundamentals and Applications”

Septiembre 2007

XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Habana (Cuba)
“Transportecuantico en nanocontactos: fundamentos y aplicaciones”

Octubre 2007

1st Spain-Taiwan Nano-Electronics Workshop, Barcelona (España)
“Modeling in Nanoscience and Nanotechnology”

Octubre 2007

VI Brazilian Materials Research Society Meeting, Natal (Brasil)
“Quantum transport from NEGF-DFT: Fundamentals and Applications”

Octubre 2008

2nd Taiwan-Spain Micro/Nano Electronics Workshop, Tainan (Taiwan)
“Simulation of electronic transport in nanostructures from First-Principles”

Diciembre 2008

At the Frontiers of Condensed Matter IV: Current Trends and Novel Materials, Buenos Aires (Argentina)
“Applications of First-Principles simulations of quantum transport”

Mayo, 2009

International Workshop on “Modeling of Carbon and Inorganic Nanotubes and Nanos-

tructures”. CECAM, Lausanne (Suiza)

“Electron transport between graphene layers connected by nanotubes”

Junio, 2009

International Workshop on “Theoretical Modeling of Transport in Nanostructures”, CECAM, Lausanne (Suiza)

“Transport in graphene layers connected by carbon nanotubes”

Octubre, 2009

International Workshop on “Computational Physics and Chemistry of Graphene”, CECAM, Lausanne (Suiza)

“Transport properties of Carbon Nanotube links connecting Graphene layers”

Octubre, 2009

NanoICT Symposium, San Sebastián (España)

“Transport properties of carbon nanotube links between graphene layers”

Mayo, 2010

GENNESYS International Congress on Nanotechnology and Research Infrastructures, Barcelona (España)

“New strategies for Nanomaterials Design: Simulation”

Mayo, 2010

“Atomistic and Molecular Simulations: Challenges for the next decade”, Launching conference for the Z-CAM Center, Zaragoza, (España)

“Ab-initio simulations in Nanoscience: Challenges and Activities in teh BNC-b”

Junio, 2010

TAMC VI “Theory of Atomic and Molecular Clusters” Conference, México D.F. (México)

“Electronic transport in DNA and nanotube nanostructures”

Septiembre, 2010

CECAM Workshop on “Approximate Quantum-Methods: Advances, Challenges and Perspectives” Bremen (Alemania)

“The SIESTA project: recent developments”.

Marzo, 2011

4th Nano Safety for Success Dialogue, Bruselas (Bélgica).

“Nanomaterials design for safe products: computational and infrastructure factors”

Abril, 2011

HPC Symposium, Imaginenano 2011 Conference, Bilbao, España

“Exploring the real nanoworld using HPC beyond the ab-initio approach”

Abril, 2011

HPC Symposium, Imaginenano 2011 Conference, Bilbao, España

“Exploring the real nanoworld using HPC beyond the ab-initio approach”

May-June, 2011

EuroNanoForum 2011, Budapest, Hungría

“Nanomaterials Simulation and Design for Efficient and Safe Products: Computational and Infrastructure Factors”

Junio, 2011

Workshop “Nanomediterraneo 3”, Palma de Mallorca, España

“Transport in nanostructured materials and nanoscale devices: a perspective from ab initio simulations”

Julio, 2011

WATOC Satellite Meeting on “Theoretical modeling of materials”, Barcelona, España

“Electronic transport in chemically-modified graphene”

Julio, 2011

WATOC Satellite Meeting on “Strongly correlated systems: cooperativity and valence bond theory”, La Coruña, España

“Electronic transport in chemically-modified graphene”

Septiembre, 2011

Workshop on “Towards a multi-scale, multi-phenomena modelling - simulation - design - engineering environment and tools”, Bruselas, Bélgica

“Atomistic Simulations: First-Principles Approaches towards Multi-Scale”

Septiembre, 2011

Graphene Roadmap Consultation Workshop: “First-Principles Computational Methodologies for 2D Materials”, Lancaster, Reino Unido.

“Large Scale Modeling in Graphene: First Principles and Beyond”

Octubre-Noviembre, 2011

4th Workshop on “New Methods for Electronic Structure Calculations”, La Plata, Argentina

“Transport in nanostructures: first principles and multi-scale approaches”

Noviembre, 2011

Trends in Nanotechnology 2011, Tenerife, España

“Beating the Size Limits of First-Principles Calculations in Nanoscale Systems”

Diciembre, 2011

CECAM Workshop on “Simulation and Modeling of Emerging Electronics”, Hong Kong, China.

“Electronic transport in chemically modified graphene”

Octubre 2012

Conference of Computational Physics - CCP2012, Kobe, Japón

“First Principles Simulations in the Nanoscale”

Septiembre 2013

Trends in Nanotechnology 2013, Sevilla, España

“Layered and two-dimensional materials explored from first-principles”

Enero 2015

9th International Conference of Computational Physics, Singapur

“Using localized orbitals to describe electronic structure and quantum transport in two-dimensional materials”

Enero 2015

Euro-TMCS - Theory Modeling and Computational Methods for Semiconductors, Granada, España.

“Density Functional Theory Simulations using the SIESTA Method”

Junio 2015

Workshop on “Advanced Modeling of Materials: Farewell to Prof. M. Mareschal”, ZCAM, Zaragoza,

“Using localized orbitals to describe electronic structure and quantum transport in two-dimensional materials”

28 Agosto - 1 Septiembre 2016

30th Meeting of the European Crystallographic Association, Basel, Switzerland

“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from first principles”

Agosto 2016

E-CAM Industry Meeting, Mainz, Germany

“MaX Center of Excellence: Materials at the Exascale

Septiembre 2016

2016 International Graphene Innovation Conference, Qingdao, China

“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from First Principles”

Enero 2018

MaX International Conference, ICTP - Trieste, Italia

“On the Enhancement of Thermal Properties of Graphene Nanofluids”

Marzo 2018

Nanospain 2018, Bilbao, España

“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from first principles”

Abril 2018

1st SP2 Network Workshop, Madrid, España

“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from first principles”

Junio 2018

Nanotech France 2018, Paris, Francia

“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from first principles”

Septiembre 2018

European Materials Society Fall Meeting, Varsovia, Polonia

“Theoretical methods, numerical algorithms and simulation tools for materials design”

Noviembre 2018

International Workshop “Game of Materials”, Dubrovnik, Croacia

“Charge Density Waves in Transition Metal Dichalcogenides”

Congresos Nacionales

Junio 1999

“Encuentro Nacional sobre Aplicaciones de la Química Cuántica a Problemas de Física de la Materia Condensada”, Laredo (Santander).

“DFT Calculations With Linear Scaling: The SIESTA Approach”

Junio 2001

“V Escuela Nacional de Materiales Moleculares” Peñíscola (Castellón).

“Nanotubos de carbono: aspectos fundamentales y aplicaciones”

Julio 2005

“XXI Reunión de la Xarxa de Química Teórica Catalana” Barcelona

“Cálculos DFT en sistemas complejos: de biomoléculas a transporte en nanoestructuras”

Marzo 2006

“Spanish Molecular Electronics Symposium”, San Sebastian
“Resistive and rectifying effects of pulling gold atoms at thiol-gold nanocontacts”

Julio, 2009

Workshop “Nanomediterraneo”, Castellón
“Simulaciones de transporte electrónico en nanoestructuras”

Septiembre, 2013

XXXIV Biental de la Real Sociedad Española de Química
“Large scale ab-initio simulations in Nanoscience”

3.8. OTROS SEMINARIOS Y CONFERENCIAS

Septiembre, 1990

Dept. of Atomic and Interface Physics. Buys Ballot Laboratory. Utrecht (Holanda).
“Theoretical study of the electronic and vibrational structure of SiO_x and SiN_x”.

Marzo, 1991

Lab. d’Estudes des Proprietes Electroniques des Solides. CNRS. Grenoble (Francia).
“Theoretical study of the electronic and vibrational structure of silicon oxides, nitrides and oxinitrides”.

Junio, 1993

Departamento de Física de Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid.
“Cálculos electrónicos en sistemas de gran tamaño: Métodos de Orden-N”

Mayo, 1994

University of Kentucky. Lexington (USA)
“Linear system size scaling methods for electronic structure calculations”

Junio, 1994

Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, CSIC.
“Métodos de Orden-N en calculos de estructura electrónica y dinámica molecular”

Junio, 1995

Universidad Tecnica de Chemnitz (RFA)
“Linear scaling methods in electronic structure calculations”

Junio, 1995

Max Planck Institut fur Festkorperforschung, Stuttgart (RFA)
“Recent advances in linear scaling methods”

Septiembre, 1995

Quantum Nanostructures Seminar, Beckman Institute, University of Illinois at Urbana-Champaign (USA)
“Quantum simulations in very large systems: Order-N methods”

Junio, 1996

IRRMA, Lausanne (Suiza).
“Phonon calculations from electronic structure Order-N methods”

Junio, 1997

Departamento de Física Fundamental y Experimental, Univ. de La Laguna (España)
“Métodos de Orden-N”

Junio, 1997

Departamento de Física Fundamental y Experimental, Univ. de La Laguna (España)
“Cálculos LDA y GGA con tiempos proporcionales al tamaño del sistema”

Junio, 1997

Departamento de Física Aplicada, Universidad del País Vasco, Bilbao (España)
“Nuevos métodos *ab-initio* con esfuerzo de cálculo proporcional al tamaño del sistema”

Octubre, 1997

Chemical, Bio and Materials Department, Arizona State University, Phoenix, Arizona (USA)
“First principles calculation with Order-N scaling”

Octubre, 1997

Motorola Phoenix Corporate Research Laboratories, Phoenix, Arizona (USA)
“First principles calculation with Order-N scaling”

Julio, 1998

Fritz Habber Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin (Alemania)
“Density Functional O(N) calculations”

Julio, 1998

Technical University of Berlin, Berlin (Alemania)
“LCAO approach for Density Functional Theory with Linear Scaling”

Septiembre, 1998

Instituto de Física, UNAM, México DF (México)
“Calculos ab-initio de las propiedades físicas de materiales nanométricos”.

Diciembre, 1998

German Cancer Research Center, Heidelberg (Alemania)
“Density-functional methods for very large biomolecules”

Septiembre, 1999

Departamento de Física de Materia Condensada, Universitat de Barcelona (España).
“Calculos DFT para sistemas con gran número de átomos”

Noviembre, 1999

Institute of Molecular Science, Okazaki (Japón)
“Large Scale DFT Calculations with SIESTA”

Noviembre, 1999

Institut de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC, Bellaterra (España)
“Explorando la frontera cuántica de los materiales: de fullerenos a biomoléculas”

Febrero, 2001

Queen’s University of Belfast (R.U.)
“Linear scaling DFT calculations with atomic orbitals”

Mayo, 2001

Ciclo de Conferencias “Nanotecnología y Nanomateriales: El paradigma del Siglo XXI”
Residencia de Investigadores CSIC-Generalitat de Catalunya, Barcelona, (España)
“Simulación a escala atómica de materiales”

Diciembre, 2001

Departament d’Estructura i Constituents de la Materia, Unversitat de Barcelona (España)
“Calculos ab-initio en materiales complejos”

Febrero, 2002

Instituto de Ciencia de Materiales de la Universidad de Valencia, Burjassot, Valencia (España)

“Calculos ab-initio en materiales complejos”

Junio, 2002

Département de Physique de Matériaux, Université Claude Bernard, Lyon (Francia)

“Order-N methods”

Abril 2003

Donostia International Physics Center, San Sebastián (España)

“First principles calculations of ballistic transport in nanoscale systems”

Octubre 2003

Condensed Matter and Surface Science Colloquium, Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens, Ohio (USA)

“Non-Equilibrium Electronic Transport in Nanostructures: A Simulation Tool”

Octubre 2003

Département de Physique, Université de Montréal (Canada)

“Non-Equilibrium Electronic Transport in Nanostructures: A Simulation Tool”

Octubre 2003

Materials Research Lab., University of Illinois at Urbana-Champaign, Illinois (USA)

“Non-Equilibrium Electronic Transport in Nanostructures: A Simulation Tool”

Octubre 2003

Beckman Institute, University of Illinois at Urbana-Champaign, Illinois (USA)

“First-principles studies of nanotubes”

Noviembre 2003

Materials and Manufacturing Directorate, Air Force Research Lab., Dayton, Ohio (USA)

“Computing the properties of materials from first principles with Siesta”

Marzo 2004

Surface Science Research Centre, University of Liverpool (UK)

“Development of Order-N methods in Density Functional Theory”

Marzo 2004

Earth Science Department, Cambridge University (UK)

“Non-equilibrium electronic transport in nanostructures: a simulation tool”

Septiembre 2004

Air Products and Chemicals, Allentown, PA (USA)

“Materials design and processes for improved copper deposition on diffusion layers via ALD”

Noviembre 2004

Laboratoire Collisions, Agrégats, Réactivité, IRSAMC Université Paul Sabatier, Toulouse (Francia)

“Electronic transport in nanostructures from first principles: a simulation tool”

Mayo 2005

Departamento de Física Fundamental, Universidad de Barcelona (España)

“Using local orbitals to compute the properties of materials from first principles”

Noviembre 2005

Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco (España)

“Retos en la Teoría de la Materia Condensada”

Mayo 2006

Facultad de Física, Universidad de La Laguna (España)
“Transporte electrónico en sistemas nanométricos: cálculos de primeros principios”
Mayo 2006
Facultad de Física, Universidad de La Laguna (España)
“Problemas actuales en Estructura Electrónica de Superficies: metalización y ondas de densidad de carga”
Junio 2006
Physics Department, Chalmers University of Technology, Goteborg (Suecia)
“Electronic transport in nanostructures from first principles”
Julio 2006
Physics Department, Twente University, Enschede (Holanda)
“Electronic transport in nanostructures from first principles”
Febrero 2007
Departamento de Física, Universidad Complutense de Madrid (España).
“Cálculos de Primeros Principios en Sistemas de Gran Tamaño: El método SIESTA”
Noviembre 2008
Nanoscale Physics Research Laboratory, University of Birmingham (U.K.)
“First-Principles and QM/MM simulations with the SIESTA method”
Marzo 2011
Departamento de Física, Universidad de Palermo (Italia)
“Quantum mechanical simulations from first-principles using the SIESTA method”
Abril 2011
Departamento de Química, Universidad de Palermo (Italia)
“Density functional simulations in large scale systems with the SIESTA method”
Junio 2011
Department of Materials Sciences, Oxford University (UK)
“Electronic transport in chemically-modified graphene”
Octubre 2011
Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires (Argentina)
“Transport in nanostructures: first principles and multi-scale approaches”
Febrero 2013
School of Materials Science and Engineering, Nanyang Technological University (Singapur)
“Electronic transport in chemically modified and in amorphous graphene”
Marzo 2013
Graphene Research Centre, National University of Singapore (Singapur)
“Electronic transport in chemically modified and in amorphous graphene”
Junio 2015
“The Seidman Family Lecture Series”, University of Tel Aviv (Israel)
“Simulation of electronic transport in nanostructures”
Marzo 2016
Institute of Functional Nano & Soft Materials, Soochow University (China)
“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from First Principles”
Enero 2018
Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati - SISSA, Trieste (Italia)
“Layered and 2D materials: electronic properties and structural instabilities from First Principles”

Mayo 2018

University of Amsterdam, Amsterdam (Holanda)

“What can a good SIESTA do for you?”

Marzo 2019

SUNY, Stony Brook (USA)

“Charge Density Waves in the Blue Bronzes and some 2D Transition Metal Dichalcogenides”

4. GESTIÓN DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA

4.1. CARGOS DESEMPEÑADOS

Septiembre 2000 - Octubre 2004

Jefe del Servicio de Informática y Comunicaciones del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (CSIC).

Noviembre 2004 - Septiembre 2007

Coordinador del Servicio de Informática y Comunicaciones del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (CSIC).

Febrero 2004 - Enero 2007

Responsable del Area de Física de Materia Condensada, adjunto al Coordinador del Area de Física y Ciencias del Espacio de la ANEP (Agencia Nacional de Evaluación y Prospec-tiva).

Febrero 2010 - Abril 2013

Sub-director en funciones del Centro de Investigación en Nanociencia y Nanotecnología - CIN2.

Desde Julio 2012

Director de la Fundación Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología - ICN2.

2013-2018

Director del Centro de Investigación en Nanociencia y Nanotecnología - CIN2.

Desde Junio 2015

Miembro del Patronato de la Fundación BIST - Barcelona Institute of Science and Tec-nology

4.2. COMITÉS CIENTÍFICOS PERMANENTES

1999 - 2008

Portavoz del grupo de Orden-N y Tight-Binding en el Programme Psi-k “Electronic Structure Calculations for Elucidating the Complex Atomistic Behaviour of Solids and Surfaces”, de la European Science Foundation.

2000 - 2013

Miembro del Scientific Committee of the “Total Energies and Forces” series of conferences organized by the ICTP-Trieste.

2002 - 2008

Representante de España en el Steering Committee del Programme “Towards Atomistic Materials Design (Psi-k)”, de la European Science Foundation.

Desde 2003

Miembro del Comité Científico de la Red Española de Nanotecnología “NanoSpain”

Desde 2008

Miembro del Scientific Advisory Committee de Red “Psi-k”.

Desde 2010

Miembro de la Comisión de Grandes Usuarios de Supercomputacion (GUCAP) del Centro de Supercomputación de Cataluña (CESCA)

Desde 2018

Miembro del Comité Científico Asesor y Coordinador del Area de Física y Ciencias del Universo de la Fundación Gadea Ciencia

4.3. TAREAS EDITORIALES

2004-2008

“Regional Editor” de Physica Status Solidi (a), (b) y (c)

Desde 2004

Miembro del “Editorial Board” de Physica Status Solidi (a), (b) y (c)

Desde 2007

Miembro del “Editorial Board” de Physica Status Solidi - Rapid Research Letters

Mayo de 2006

Guest Editor del Special Issue “Trends in Nanotechnology (TNT2005)” de Physica Status Solidi (a) **203**

Mayo de 2006

Guest Editor del Special Issue “Towards Atomistic Materials Design” de Physica Status Solidi (b) **243**

Junio de 2007

Guest Editor del Special Issue “Trends in Nanotechnology (TNT2006)” de Physica Status Solidi (a) **204**

Junio de 2008

Guest Editor del Special Issue “Trends in Nanotechnology (TNT2007)” de Physica Status Solidi (a) **205**

2010 - 2015

Co-Editor de EPL (anteriormente Euro Physics Letters).

Desde Abril de 2018

Miembro del Editorial Board de Nanomaterials.

4.4. TAREAS DE EVALUACIÓN CIENTÍFICA

- 1.- Febrero de 2004 - Enero de 2007: Miembro (Adjunto al Coordinador) del equipo responsable del Area de Física y Ciencias del Espacio de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP).
- 2.- Mayo de 2005: Miembro del “Review Panel” del Schwerpunktprogramm “Modern and universal first-principles methods for many-electron systems in chemistry and physics” del Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Alemania.
- 3.- Enero de 2006 - Diciembre 2010: Coordinador del Area de Física e Ingeniería del Comité de Acceso a MareNostrum, en el Centro Nacional de Supercomputación de Barcelona
- 4.- Desde Noviembre de 2006: Miembro del Advisory Panel del ICAM-I2CAM ‘Institute for Complex Adaptative matter’, del NSF (USA).

- 5.- Desde Junio de 2008: Miembro del Panel de Expertos de la Acreditación Nacional para el Acceso a los Cuerpos Docentes Universitarios (Programa ACADEMIA) de la ANECA (Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación),
- 6.- Desde Octubre de 2011: Miembro del Priorization Panel del programa PRACE - "Partnership for Advanced Computing in Europe"
- 7.- Referee en revistas internacionales, entre otras:
 - Nature
 - Physical Review Letters
 - Journal of the American Chemical Society
 - PNAS
 - Nature Communications
 - Nanoletters
 - ACS Nano
 - 2D Materials
 - Physical Review B
 - Chemical Society Reviews
 - Journal of Physical Chemistry
 - Applied Physics Letters
 - Journal of Physics Condensed Matter
 - Journal of Applied Physics
 - Europhysics Letters - EPL
 - Theochem
 - Journal of Chemical Theory and Computation
 - Solid State Communications
 - New Journal of Physics
 - Accounts of Chemical Research
 - Annalen der Physik
 - Physics Letters A
 - Surface Science
 - Journal of Biomolecular Structure and Dynamics
 - Physica Status Solidi (b)
 - Nanotechnology
 - Computational Materials Science
 - International Journal of Quantum Chemistry
 - Chemical Science
 - Advanced Materials Interfaces
- 8.- Evaluador de proyectos de las siguientes Instituciones y Agencias:
 - Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva, España
 - European Research Council
 - National Science Foundation, USA
 - Cornell Theory Center, Cornell University, USA

- Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), Argentina.
 - USA - Israel Binational Science Foundation.
 - Programa de Iniciativa Científica Milenio, Minist. de Planificación y Cooperación, Chile
 - Engineering and Physical Sciences Research Council, Reino Unido
 - Directorate General for Information Society Technologies, European Commission
 - L'Agenzia Nazionale per la Valutazione del sistema Universitario e della Ricerca (AN-VUR), Italia
 - Ikerbasque, Basque Foundation for Science, España
 - ICREA, Catalan Institution for Research and Advanced Studies, España
 - Fundación Bancaria La Caixa, España
 - University of Luxembourg, Luxembourg
 - Foundation for Polish Science, Polonia
 - Fundação para a Ciência e a Tecnologia, Portugal
 - Swedish Research Council, Suecia
 - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire - CECAM, Suiza
 - Kentucky Science & Engineering Foundation
 - Swiss Platform for Advanced Scientific Computing (PASC), Suiza
 - Tel Aviv University, Israel
 - Austrian Science Fund (FWF), Austria
 - Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), Holanda
 - Comisin Asesora de Física de CONICET, Argentina
- 9.- Miembro Titular de Tribunal en cuatro Plazas de Científico Titular (Presidente en dos de ellas) y una plaza de Investigador Científico del CSIC.
- 10.- Miembro de Tribunal en alrededor de 30 Tesis Doctorales.