

## Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre y apellidos	Antonio M. Márquez Cruz		
DNI/NIE/pasaporte	27292146R	Edad	55
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	M-2878-2014	
	Código Orcid	0000-0002-0859-0450	

### A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Facultad de Química/ Dpto. Química Física		
Dirección	C/ Profesor García González, 1		
Teléfono	955421002	Correo electrónico	marquez@us.es
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	21/12/2017
Espec. cód. UNESCO	2210;221001-1;220923		
Palabras clave	Computación, simulación de materiales, DFT, catálisis heterogénea		

### A.2. Formación académica (*título, institución, fecha*)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Química	Universidad de Sevilla	1986
Doctor en Química	Universidad de Sevilla	1991

### A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica

Número de sexenios de investigación: 5. Fecha de entrada en vigor del último concedido: 1/1/2016.

Tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años: 2.

Citas totales 1798 (Scopus). Promedio de citas/año durante los últimos 5 años: 94.4.

Publicaciones totales en primer cuartil (Q1) durante los últimos 5 años: 20

Índice h: 26 (Scopus)

## Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

PhD in Chemistry in 1991 from the University of Sevilla with full honors. Worked in 1991-1992 at the "Chemistry Applications Management" Department of IBM Kingston as a postdoctoral researcher with Dr. Michel Dupuis. His postdoctoral research was focused on the implementation of efficient algorithms for post-SCF methods that could be applied to large molecular systems. Back to the University of Sevilla his research focused now on the implementation of parallel algorithms in Quantum Chemistry methods and started to develop some interest in the development of cluster models for the study of the structure and reactivity on solid heterogeneous catalysts. In relation with these interests he was invited in 1999 to the Univ. of Barcelona under the program "Access to Supercomputing Facilities for European Researchers". In 2000, he became professor of Physical Chemistry and since then his investigations have been essentially dedicated to the study, by means of theoretical models, of the structure and reactivity of solid systems and surfaces with emphasis on diverse heterogeneous catalysts.

I have published nearly 90 research papers, many of them in major (Q1) international journals. These include, J. Phys. Chem. (20), J. Am. Chem. Soc. (4), J. Comput. Chem. (3), Phys. Rev. B (3), Phys. Chem. Chem. Phys. (2), J. Chem. Phys. (2) Angew. Chem. Int. Ed. (1), Phys. Rev. Lett. (1), ACS Catalysis (2), Chem. Mat. (1), J. Chem. Theo. Comput. (1), J. Org. Chem. (1), and J. Phys. Chem. Lett. (1), among others.

In relation with his duties in superior education, he has been regularly in charge and coordinator of undergraduate Physical Chemistry courses for about 18 years. Simultaneously he has been teaching postgraduate (Doctorate and Master) courses related to Molecular Modelling and Electronic Structure and Properties of Solids and Surfaces being coordinator

of the latter at the Master in Theoretical Chemistry and Computational Chemistry (TCCM), recognized as Erasmus Mundus Joint Master Degree under the Erasmus+ Programme.

### **Puestos académicos desempeñados**

- 1987-1990: Estudiante de Doctorado - FPI. Univ. de Sevilla
- 1991-1992: Postdoctoral Scientist, IBM Corporation, NY, EE.UU.
- 1992-1995: Investigador postdoctoral, Univ. de Sevilla.
- 1995-2000: Profesor Asociado. Univ. de Sevilla.
- 2000-2017: Profesor Titular de Universidad. Univ. de Sevilla.
- 2017-: Catedrático de Universidad. Univ. de Sevilla.

### **Estancias en otros centros**

- Université de Pau et des Pays de l'Adour. Pau (Francia). 1988 (12 semanas); 1989 (12 semanas).
- Université Louis Pasteur. Estrasburgo (Francia). 1989 (11 semanas); 1990 (4 semanas).
- Chemistry Application and Management Department, IBM Corporation. Kingston, (NY, EE.UU.). 1991-1992 (100 semanas).
- Universidad de Barcelona. Duración: 1999 (4 semanas).

### **Actividad como evaluador**

- Revistas: J. Phys. Chem.; J. Am. Chem. Soc.; Phys. Rev. Lett.; Phys. Rev. B; Surf. Sci.; Phys. Chem. Chem. Phys.; Scientific Reports; Physica B; Appl. Surf. Sci.; ACS Appl. Mater. Interfaces; Comput. Theor. Chem.

### **Líneas de investigación:**

- Catálisis computacional. Desarrollo y aplicación de métodos y modelos para simular las propiedades y reacciones en superficies de metales y óxidos metálicos utilizando teoría químico-cuántica y estadística.
- Desarrollo de modelos para el análisis de las propiedades de nanopartículas de metales de transición soportadas y su actividad catalítica.
- Captación de energía y procesos de transferencia de electrones en celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSSC) y quantum dots (QDSC).

## **Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES**

### **C.1. Publicaciones**

Listado de 10 publicaciones más relevantes (últimos 10 años):

1. G. Kyriakou, A.M. Márquez, J.P. Holgado, M.J. Taylor, A.E.H. Wheatley, J.P. Metha, J. Fernández Sanz, S.K. Beaumont, R.M. Lambert. A comprehensive experimental and theoretical study of the CO + NO reaction catalyzed by Au/Ni nanoparticles. *ACS Catal.* **2019**, 9, 9419-9429.
2. N. Orozco, G. Kyriakou, S.K. Beaumont, J. Fdez. Sanz, J.P. Holgado, M.J. Taylor, J.P. Espinós, A.M. Márquez, D.J. Watson, A.R. González-Elípe, R.M. Lambert. Critical role of oxygen in silver-catalyzed Glaser-Hay coupling on Ag (100) in vacuum and solution on Ag particles. *ACS Catal.* **2017**, 7, 3113-3120.
3. J. Amaya Suárez, J.J. Plata, A.M. Márquez, J. Fdez. Sanz. Effects of the capping ligands, linkers and oxide surface in the electron injection mechanism of copper sulfide Quantum Dots sensitized solar cells. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 14580-14587.

4. J.J. Plata, A. M. Márquez, and J. Fdez. Sanz. Understanding the Interplay of Dopants, Interfaces, and Anionic Conductivity in Doped Ceria/Zirconia Heteroepitaxial Structures. *Chem. Mater.* **2014**, 26, 3385- 3390.
5. J.J. Plata, A.M. Márquez, J. Fdez-Sanz. Electron mobility via polaron hopping in bulk ceria: a first principles-study. *J. Phys. Chem. C.* **2013**, 117, 14502-14509.
6. J.J. Plata, I. Ruiz-Tagle, A. M. Márquez, and J. Fdez Sanz. Ceria (100) Nanotubes with Negative Strain Energy: A First-Principles Prediction. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2012**, 3, 2092.
7. A.M. Márquez, J.J. Plata, Y. Ortega, J. Fdez-Sanz, G. Colón, A. Kubacka, M. Fernández García. Making photo-selective TiO<sub>2</sub> materials by cation-anion cooping: from structure and electronic properties to photoactivity. *J. Phys. Chem. C.* **2012**, 116, 18759-18767.
8. J. Graciani, A. M. Márquez, J.J. Plata, Y. Ortega, N. C. Hernández, A. Meyer, C. M. Zicovich-Wilson, and J. Fdez Sanz. Comparative Study of the Performance of Hybrid DFT Functionals in Highly Correlated Oxides: The Case of CeO<sub>2</sub> and Ce<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *J. Chem. Theor. Comput.*, **2011**, 7, 56-65.
9. A.M. Márquez, J.J. Plata, Y. Ortega, J. Fdez-Sanz. Structural defects in W-doped TiO<sub>2</sub> (101) anatase surface: a density functional study. *J. Phys. Chem. C.* **2011**, 115, 16970-16976.
10. R. Sánchez de Armas, M.A. San Miguel, J. Oviedo, A.M. Márquez, J. Fdez Sanz. Electronic Structure and optical spectra of catechol on TiO<sub>2</sub> nanoparticles from real time TD-DFT simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13, 1506-1514.

## C.2. Proyectos

### Como investigador.

1. Ref. CTQ2015-64669-P. Título: Diseño computacional de Catalizadores Avanzados: nanopartículas metálicas soportadas sobre óxidos metálicos mixtos. IP: Javier Fernández Sanz. 1/1/2016-31/12/2019. MINECO. Subvención: 61 589 €. Estado: concedido y en curso.
2. Ref. MAT2012-31526. Título: Simulación de Catalizadores: Nanopartículas de Metales y Óxidos Metálicos Depositadas en Soporte: Estructura, Propiedades Electrónicas y Actividad Catalítica. IP: Javier Fernández Sanz. 1/1/2013-31/12/2015. MINECO. Subvención: 55 000 €. Estado: terminado.
3. Ref. MAT2008-04918. Título: Simulación de catalizadores, reactividad de superficies de TiO<sub>2</sub> y SnO<sub>2</sub> dopadas con C, N y Sb, interfases metal/soporte, y propiedades electrónicas de sistemas de tipo colorante/soporte. IP. Javier Fernández Sanz. 1/1/2009-31/12/2011. MICINN. Subvención: 136 000 €. Estado: terminado.
4. Ref. MAT2005-01872. Título: Simulación de catalizadores metales soportados en óxidos de aluminio, titanio y cerio. IP. Javier Fernández Sanz. 31/12/2005-31/12/2008. MEC. Subvención: 134 000 €. Estado: terminado
5. Ref. Consolider-Ingenio, CSD2008-00023. Título: Funcionalización superficial de materiales para aplicaciones de alto valor añadido (FUNCOAT). IP: J.M. Albella (coordinador), J. Fernández Sanz y 15 más. 31/12/2005-31/12/2008. MICINN. Subvención: total 4.5 M€; asignado a la USE 199 672 €. Estado: terminado.
6. Ref. P12-FQM-1595. Título: Celdas solares con sensibilizador: Propiedades electrónicas de nanoestructuras de sulfuros metálicos utilizados como captosres de energía (QDSC). IP: J. Fernández Sanz. 31/1/2014-16/2/2019. Junta de Andalucía. Subvención: 150 644 €. Estado: concedido y en curso.

7. Ref. P08-FQM-03661. Título: Celdas solares con sensibilizador: simulación de la estructura de la interfase electrolito semiconductor. IP: J. Fernández Sanz. 3/1/2009-13/1/2012. Junta de Andalucía. Subvención: 151 323 €. Estado: terminado.

### **C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia**

1. Aplicación de la Química Computacional a procesos catalíticos de epoxidación. (1735/0638). Empresa: REPSOL S. A. Inicio: 20/12/2012; finaliza 30/09/2013. Cuantía: 38.500 € Investigador principal: J. F. Sanz.
2. Estudio computacional de la interacción entre un material silíceo y dos fluidos inmiscibles (2264/0638). Empresa REPSOL S.A. Inicio: 1/7/2014. Fin: 30/11/2015. Cuantía: 100.000 € Investigador principal: J.F. Sanz.

### **C.5. Otros:**

#### **Premios.**

- Premio al mejor expediente Académico de la Facultad de Química. Ayuntamiento de Sevilla. 1986.
- Premio al mejor expediente Académico de la Facultad de Química. Real Maestranza de Caballería. 1987.
- Premio extraordinario de Doctorado. Universidad de Sevilla. 1992.

#### **Tesis dirigidas.**

- José Javier Plata Ramos. Ceria for all seasons. Defendida en 2013. Premio extraordinario de doctorado de la Universidad de Sevilla.
- Javier Amaya Suárez. Propiedades optoelectrónicas de óxidos y sulfuros metálicos. Defendida en 2019.