

Curriculum vitae

NOMBRE: JOSÉ ORTEGA MATEO

Fecha: Febrero, 2019

1. Datos personales

APELLIDOS Y NOMBRE: Ortega Mateo, José

NÚMERO DEL D.N.I. 51358679R

FECHA DE NACIMIENTO: 26/08/1963

ENTIDAD: Universidad Autónoma de Madrid

FACULTAD: Facultad de Ciencias

DEPARTAMENTO: Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

DIRECCIÓN POSTAL: Cantoblanco, 28049 Madrid.

TELÉFONO: 91-4976145

FAX: 91-4974950

CORREO ELECTRÓNICO: jose.ortega@uam.es

ESPECIALIZACIÓN (CÓDIGOS UNESCO): Física del Estado Sólido (2211)

CATEGORIA PROFESIONAL: Catedrático de Universidad

FECHA DE INICIO: 28/12/17.

SITUACIÓN ADMINISTRATIVA: PLANTILLA

DEDICACIÓN: A TIEMPO COMPLETO

PÁGINA WEB: www.uam.es/jose.ortega

RESEARCHER ID: I-4358-2014

ORCID: 0000-0001-9156-1038

2. Títulos académicos

CLASE: Licenciado en Ciencias (Físicas)

ORGANISMO DE EXPEDICIÓN: Universidad Autónoma de Madrid

CENTRO DE EXPEDICIÓN: Facultad de Ciencias

FECHA DE EXPEDICIÓN: 17 de diciembre de 1986

CLASE: Grado de Licenciado en Ciencias (Físicas)

ORGANISMO DE EXPEDICIÓN: Universidad Autónoma de Madrid

CENTRO DE EXPEDICIÓN: Facultad de Ciencias

FECHA DE EXPEDICIÓN: 2 de abril de 1987

TÍTULO DE LA TESIS: *Análisis de la formación de la barrera Schottky en una interfase abrupta metal-semiconductor*

CALIFICACIÓN: Sobresaliente

CLASE: Doctor en Ciencias (Físicas)

ORGANISMO DE EXPEDICIÓN: Universidad Autónoma de Madrid

CENTRO DE EXPEDICIÓN: Facultad de Ciencias

FECHA DE EXPEDICIÓN: 27 de septiembre 1991

TÍTULO DE LA TESIS: *Quimisorción y la formación de la barrera Schottky*

CALIFICACIÓN: Apto *cum laude*

Premio Extraordinario de Doctorado

3. Puestos docentes desempeñados

- Profesor Ayudante de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 1 de Marzo de 1987
Fecha de terminación: 30 de Septiembre de 1987

- Profesor Ayudante de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 1 de Octubre de 1990
Fecha de terminación: 30 de Septiembre de 1991

- Profesor Titular de Universidad Interino.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 1 de Octubre de 1991
Fecha de terminación: 30 de Septiembre de 1992

- Profesor Titular de Universidad Interino.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 16 de Diciembre de 1994
Fecha de terminación: 30 de Septiembre de 1995

- Profesor Titular de Universidad Interino.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 1 de Octubre de 1995
Fecha de terminación: 20 de Junio de 1996

- Profesor Titular de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 21 de Junio de 1996
Fecha de terminación: 26 de Marzo de 2014

- Catedrático de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 27 de Marzo de 2014
Fecha de terminación: 31 de Mayo de 2017

- Profesor Titular de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 1 de Junio de 2017
Fecha de terminación: 27 de Diciembre de 2017

- Catedrático de Universidad.
Centro: Universidad Autónoma de Madrid.
Régimen de dedicación: Tiempo completo.
Fecha de nombramiento: 28 de Diciembre de 2017
Fecha de terminación: -

4. Actividad docente desempeñada

4.1 Como Profesor Titular / Catedrático de Universidad:

- Profesor responsable de la asignatura *Física General I*
Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 1994-95, 1995-96, 1996-97, 1997-98 y 1998-99.
- Profesor responsable de la asignatura *Física General I*
Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Químicas
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 1991-92.
- Profesor responsable de la asignatura *Física General para biólogos*
Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Biológicas
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 1991-92.
- Profesor responsable de la asignatura *Mecánica y Ondas*
Segundo curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 1994-95.
- Profesor responsable de la asignatura *Mecánica Cuántica I*
Cuarto curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 1999-2000, 2000-01 y 2001-02.
- Director del Laboratorio de la asignatura *Física II*
Primer curso de Ingeniería Técnica Industrial
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 1999-2000, 2000-01, 2001-02, 2002-03, 2003-04, 2004-05, 2005-06, 2006-07.
- Profesor responsable de la asignatura *Física II*
Primer curso de Ingeniería Técnica Industrial
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 2002-2003, 2003-04, 2004-05, 2005-06, 2006-07.
- Curso de Doctorado *Simulaciones Clásicas y Cuánticas de Sistemas Complejos*
Créditos: 6 (impartido en colaboración con R. Pérez y E. Velasco)
Programa de Doctorado: “ Física de la Materia Condensada”
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 1998-99.

- Curso de Doctorado *Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada*
Coordinador
Créditos: 5 (impartido en colaboración con J.M. Soler, R. Pérez y E. Velasco)
Programa de Doctorado: “ Física de la Materia Condensada”
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 2002-03, 2003-04, 2004-05, 2005-06, 2006-07.
- *Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada*
Coordinador
Créditos: 4 (impartido en colaboración con R. Pérez y E. Velasco)
Máster en Simulación de Procesos Moleculares
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 2006-07.
- Profesor responsable de la asignatura *Cálculo Numérico y Computacional*
Créditos: 4
Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología (Programa Oficial de Posgrado)
Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Murcia y Universidad de Oviedo
Cursos académicos: 2007-08, 2009-10.
- Clases de laboratorio de *Física*
Primer curso del Grado en Química
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 2011-12 (20 horas).
- Profesor responsable de la asignatura *Computación I*
Créditos: 6
Primer curso del Grado en Física
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 2009-10 (3 créditos), 2010-11, 2011-12, 2012-13.
- Profesor responsable de la asignatura *Física del Estado Sólido*
Créditos: 6
Cuarto curso del Grado en Física
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 2013-14, 2014-15, 2015-16.
- *Métodos Computacionales en Física de la Materia Condensada y Biomoléculas*
Máster en Física de la Materia Condensada y de los Sistemas Biológicos.
Créditos: 4
Cursos académicos: 2014-15, 2015-16.(impartido en colaboración con R. Pérez y R. Delgado (coordinador); créditos impartidos: 1)

Cursos académicos: 2016-17, 2017-18, 2018-19 (impartido en colaboración con R. Delgado; créditos impartidos: 2)

- *Dirección de Trabajos de Iniciación a la Investigación.*
Curso académico 2013-14: Jorge Sanjuan García.
- *Dirección de Trabajos de Fin de Grado. 2ª Parte (tutorizada).*
Curso académico 2013-14: Jorge Sanjuan García.
Curso académico 2016-17: Manuel Calvo Santesmases.
Curso académico 2017-18: Gaspar Alfaro García.
- *Dirección de Trabajos de Fin de Grado. 1ª Parte (experimental).*
Curso académico 2015-16 (en colaboración con A. Levy Yeyati): Gabriela Herrero, Andrea C. Navas, Lucía González.
Curso académico 2016-17 (en colaboración con A. Levy Yeyati): Sergio Chaves García-Mascaraque, Juan Reino González.
Curso académico 2017-18 (en colaboración con A. Levy Yeyati): Jaine Martínez-Larraz Torra, Pablo A. Morán Rodríguez, Olga Arroyo Gascón, Laura Álvaro Gómez.
- *Dirección de Trabajos de Fin de Grado (anual).*
Curso académico 2018-19: Ester García Baez (en realización).
- *Coordinador de la asignatura Trabajo de Fin de Grado, Grado en Física.*
Cursos académicos 2016-17, 2017-18, 2018-19.

4.2 Como Profesor Ayudante de Universidad:

- Clases de laboratorio de *Física General I*
Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas
Universidad Autónoma de Madrid
Cursos académicos: 1986-87 y 1990-91.
- Clases de problemas de *Física General I*
Primer curso de la Licenciatura en Ciencias Físicas
Universidad Autónoma de Madrid
Curso académico: 1986-87

5. Publicaciones

5.1 Libros, Capítulos de libros

1. *Crystal Surfaces and Surface Structure*
F. Flores, J. Ortega and R. Pérez
Survey of Semiconductor Physics (nueva edición), (2002)
Capítulo 4, páginas 63-129
Editor: K.W. Boer
Editorial: John Wiley and Sons Inc.
2. *Weak Chemical Interaction and van der Waals Forces: A Combined Density Functional and Intermolecular Perturbation Theory – Application to Graphite and Graphitic Systems*
Y.J. Dappe, J. Ortega, F. Flores,
LECTURE NOTES IN PHYSICS 795, (2010) páginas 45-79.
Editorial: Springer-Verlag Berlin Heidelberg
3. *Band Alignment in Organic Materials*
F. Flores, J. Ortega, H. Vázquez,
ADVANCES IN SOLID STATE PHYSICS 48, (2009) páginas 207-218.
Editorial : Springer Berlin / Heidelberg
4. *Molecular Photoreactivity on Metal-Oxide Surfaces from First-Principles: Photocatalysis and Photovoltaics. Book of abstracts.*
Editores: M. Pilar de Lara Castells, Néstor F. Aguirre , David López Durán, José Ortega Mateo, Alexander O. Mitrushchenkov,
ISBN: 978-84-9886-880-7
5. *Large Scale Simulations in Materials Science. Proceedings volume.*
Editado en *PHYSICA STATUS SOLIDI B 248*, volumen 248, número 9. Editores Invitados: David Drabold, Alex Demkov, James P. Lewis, José Ortega, Wolfgang Windl and Stuart Lindsay.
6. *The Molecule-Metal Interface*
Capítulo 2: *Basic Theory of the Molecule-Metal Interface*
F. Flores and J. Ortega
Editores: N. Koch, N. Ueno, A.T.S. Wee
Editorial: Wiley-VCH (2013)

7. Mechanical, Electrical and Chemical Properties of Metal Nanowires
by F. Flores, J.I. Martínez, J. Ortega and A. Zanchet
in *Recent Advances within the Field of Materials Science in Spain*
Editores: A. Berenguer *et al.*
Editorial: Universitat d'Alacant (2015).

5.2 Artículos en Revistas internacionales

1. *Schottky barrier formation in defect-free metal/III-V semiconductor junctions*
J. Sánchez-Dehesa, F. Flores, J. Ortega y J.D. Dow
Surface Science 200, 424–434 (1988).
2. *Early stage formation of Schottky barriers*
J. Ortega, J. Sánchez-Dehesa y F. Flores
Physical Review B 37, 8516–8518 (1988).
3. *Schottky barrier formation at low metal coverages: a consistent molecular-orbital calculation for K on GaAs(110)*
J. Ortega y F. Flores
Physical Review Letters 63, 2500–2503 (1989).
4. *Reply to McLean et al.*
J. Ortega y F. Flores
Physical Review Letters 65, 525 (1990).
5. *Schottky barrier formation between GaAs(110) and alkali metals*
J. Ortega, R. Pérez y F. Flores
Surface Science 251/252, 442–446 (1991).
6. *Physics for blind students: a lecture on equilibrium*
J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco y C. Sánchez
Physics Education 26, 227–230 (1991).
7. *Molecular orbital theory for chemisorption: the case of H on normal metals*
F.J. García-Vidal, A. Martín-Rodero, F. Flores, J. Ortega y R. Pérez
Physical Review B 44, 11412–11431 (1991).
8. *Low coverage deposition of alkali metals on GaAs(110)*
J. Ortega, R. Pérez F.J. García-Vidal y F. Flores
Applied Surface Science 56-58, 264–270 (1992).
9. *Semiconductor interface formation: Theoretical aspects*
F. Flores y J. Ortega
Applied Surface Science 56-58, 301–310 (1992).
10. *GaP-Si band-offset modification due to alkali metal intralayer deposition*
R. Pérez, J. Ortega, F.J. García-Vidal y F. Flores
Applied Surface Science 56-58, 756–761 (1992).

11. *Electron correlation effects in the low coverage regime of metals deposited on GaAs(110)*
F. Flores y J. Ortega
Europhysics Letters 17, 619–624 (1992).
12. *Schottky barrier formation: Al deposition on GaAs(110)*
J. Ortega, R. Rincón, R. Pérez F.J. García-Vidal y F. Flores
Applied Surface Science 60-61, 736–741 (1992).
13. *Early stages of the Schottky barrier formation for Al deposited on GaAs(110)*
J. Ortega, F.J. García-Vidal, R. Pérez, R. Rincón, F. Flores, C. Coluzza, F. Gozzo, G. Margaritondo, Y. Hwu, L. Lozzi y S. La Rosa
Physical Review B 46 10277–10283 (1992).
14. *Chemisorption of metals or electronegative atoms on GaAs*
J. Ortega, F.J. García-Vidal, R. Pérez, R. Rincón y F. Flores
Physica Scripta 45, 277–282 (1992).
15. *Schottky barrier formation in the low metal coverage limit*
F. Flores, R. Rincón, J. Ortega, F.J. García-Vidal y R. Pérez
Progress in Surface Science 42, 281–295 (1993).
16. *The interaction of atoms with semiconductor surfaces: The case of Sb on GaAs(110)*
F. Flores, R. Saiz-Pardo, R. Rincón, J. Ortega, R. Pérez y F.J. García-Vidal
Journal of Physics, Condensed Matter, 5, A41–A50 (1993).
17. *Schottky barrier formation for In deposited on GaAs(110): the low coverage limit*
J. Ortega, R. Rincón, R. Pérez F.J. García-Vidal y F. Flores
Applied Surface Science 65-66, 766–771 (1993).
18. *Chemisorption at metal and semiconductor surfaces*
F. Flores, F.J. García-Vidal, J. Ortega y R. Pérez
Philosophical Magazine B, vol. 69, 931–939 (1994).
19. *Density functional approach to LCAO Hamiltonians*
F.J. García-Vidal, J. Merino, R. Pérez, R. Rincón, J. Ortega y F. Flores
Physical Review B 50, 10537–10547 (1994).
20. *Chemisorption of In and Al on GaAs(110)*
J. Ortega, A.A. Demkov y O.F. Sankey
Journal of Applied Physics 76, 2918–2923 (1994).
21. *Simplified Electronic Structure Model for Hydrogen Bonded Systems: Water*
J. Ortega, J.P. Lewis y O.F. Sankey
Physical Review B 50, 10516–10530 (1994).

22. *Relative stability of hexagonal and planar structures of hypothetical C_3N_4 solids*
J. Ortega y O.F. Sankey
Physical Review B 51, 2624–2627 (1995).
23. *Electronic structure approach for complex silicas*
A.A. Demkov, J. Ortega, O.F. Sankey y M.P. Grumbach
Physical Review B 52, 1618–1630 (1995).
24. *Quasi-one-dimensional structures and metallization for the deposition of K on GaAs(100)-As rich surfaces*
R. Rincón, J. Ortega, F. Flores, A. Levy Yeyati y A. Martín-Rodero
Physical Review B 52, 16345–16348 (1995).
25. *Metal-Insulator transition for K on GaAs(100)-As rich surfaces*
A. Levy Yeyati, A. Martín-Rodero, F. Flores, J. Ortega y R. Rincón
Applied Surface Science 104/105, 248–252 (1996).
26. *Metal-insulator transition in the Si(111) 7 x 7 - surface*
F. Flores, A. Levy-Yeyati y J. Ortega
Surface Review and Letters 4, 281–286 (1997).
27. *First principles simulations of fluid water: The radial distribution functions*
J. Ortega, J.P. Lewis y O.F. Sankey
The Journal of Chemical Physics 106, 3696–3702 (1997).
Errata : First principles simulations of fluid water: The radial distribution functions
J. Ortega, J.P. Lewis y O.F. Sankey
The Journal of Chemical Physics 109, 1205 (1998).
28. *Formation of metal-semiconductor barriers for GaAs-interfaces in the low metal coverage limit*
F.Flores, A. levy Yeyati, A. Martín-Rodero, J. Ortega y R. Rincón
Progress in Surface Science 54, 229–240 (1997).
29. *Computational studies of Si/Al ordering in aluminosilicate tetrahedral framework structures*
V. Heine, M.T. Dove, A. de Vita, J. Ortega y E. Myers
Phase Transitions 61, 51–66 (1997).
30. *Electron correlation effects in the Si(111) 5 x 5 and 7 x 7 surfaces*
J. Ortega, A. Levy-Yeyati y F. Flores
Applied Surface Science 123/124, 131–135 (1998).
31. *Electron correlation effects in the Si(111) 7 x 7 - surface*
J. Ortega, F. Flores y A. Levy-Yeyati
Physical Review B 58, 4584–4588 (1998).

32. *First-principles methods for Tight-Binding Molecular Dynamics*
J. Ortega
Computational Materials Science 12, 192–209 (1998), invited Review paper.
33. *Electron correlation effects at semiconductor surfaces and interfaces: Si(111)-5x5, Si(111)-7x7 and Sn/Ge(111)*
J. Ortega, F. Flores, R. Pérez and A. Levy Yeyati
Progress in Surface Science 59, 233–243 (1998).
34. *Dynamical fluctuations as the origin of a surface phase transition in Sn/Ge(111)*
J. Ávila, A. Mascaraque, E.G. Michel, M.C. Asensio, G. LeLay, J. Ortega, R. Pérez y F. Flores
Physical Review Letters 82, 442–445 (1999).
35. *Many-body effects and the metal-insulator transition at semiconductor surfaces and interfaces*
F. Flores, J. Ortega and R. Pérez
Surface Review and Letters 6, 411–433 (1999).
36. *Electron Correlation Effects at semiconductor surfaces and interfaces: A Comparison of the Si(111)-3x3 and the Sn/Ge(111) -3x3 Reconstructions*
R. Pérez, J. Ortega and F. Flores,
Applied Surface Science 166, 45-50 (2000).
37. *A theoretical case study: the Sn/Ge(111)-(3x3) surface.*
J. Ortega, R. Pérez and F. Flores,
Journal of Physics : Condensed Matter 12, L21–L27 (2000).
38. *Local–density approach and quasiparticle levels for generalized Hubbard Hamiltonians.*
P. Pou, R. Pérez and F. Flores, A. Levy Yeyati, A. Martin-Rodero, J.M. Blanco, F.J. García–Vidal and J. Ortega
Physical Review B 62, 4309–4331 (2000).
39. *Surface geometry and the STM image of the Sn/Ge(111)–3×3 surface reconstruction*
L. Jurchyszyn, J. Ortega, R. Pérez and F. Flores,
Surface Science 482-5, 1350–1354 (2001).
40. *Many–body effects in the electronic structure of Sn/Si(111)– α – $\sqrt{3}$* A.Charrier, R. Pérez, F. Thibaudau, J.-M. Debever, J. Ortega, F.Flores and J.-M. Themlin
Journal of Physics : Condensed Matter 13, L521-L528 (2001).
41. *Correlated surface bands of the prototypical interface Sn/Si(111)– α – $\sqrt{3}$* A.Charrier, R. Pérez, F. Thibaudau, J.-M. Debever, J. Ortega, F.Flores and J.-M. Themlin
Applied Surface Science 175-176, 195-200 (2001).

42. *Surface soft phonon and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ phase transition in Sn/Ge(111) and Sn/Si(111)*
R. Pérez, J. Ortega and F. Flores,
Physical Review Letters 86, 4891–4894 (2001).
43. *Contrasted electronic properties of Sn-atom-based $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ reconstructions on Si(111)* A.Charrier, R. Pérez, F. Thibaudau, J.-M. Debever, J. Ortega, F.Flores and J.-M. Themlin
Physical Review B 64, 115407–1 - 115407-10 (2001).
44. *Electron correlation effects at Sn/Si(111)- $3 \times 3, \sqrt{3} \times \sqrt{3}$ and Sn/Ge(111)- $3 \times 3, \sqrt{3} \times \sqrt{3}$ reconstructions*
F. Flores, J. Ortega, R. Pérez, A.Charrier, F. Thibaudau, J.-M. Debever and J.-M. Themlin
Progress in Surface Science 67, 299-307 (2001).
45. *Further developments in the local-orbital density-functional-theory tight-binding method*
J.P. Lewis, K.R. Glaesemann, G.A. Voth, J. Fritsch, A. A. Demkov, J. Ortega and O.F. Sankey,
Physical Review B 64, 195103 (2001).
46. *Metallization and Schottky barrier formation for Se-passivated GaAs(100) interfaces*
B. Biel, I. Benito, C. González, J.M. Blanco, J. Ortega, R. Pérez y F. Flores
Applied Surface Science 190, 475-479 (2002).
47. *Ge substitutional defects and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ phase transition in α -Sn/Ge(111)*
J. Ortega, R. Pérez and F. Flores,
Journal of Physics: Condensed Matter 14, 7147-7154 (2002).
48. *Electron correlation effects and ferromagnetism in Iron*
Pablo Pou, Fernando Flores, José Ortega, Rubén Pérez and Alfredo Levy Yeyati,
Journal of Physics: Condensed Matter 14, L421-L427 (2002).
49. *Electronic structure of a surface quantum-wire array*
K. Yoo, S.J. Tang, P.T. Sprunger, I. Benito, J. Ortega, F. Flores, P.C. Snijders, M.C. Demeter and H.H. Weitering
Surface Science 514, 100-107 (2002).
50. *Dynamical fluctuations and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ phase transition in α -Sn/Ge(111) and Sn/Si(111)*
J. Ortega, R. Pérez and F. Flores,
Journal of Physics: Condensed Matter 14, 5979-6004 (2002).
51. *Exchange-Correlation Energy as a Function of the Orbital Occupancies: Implementation on First Principles Local Orbital Methods*
P. Pou, R. Oszwaldowski, H. Vázquez, R. Pérez, F. Flores and J. Ortega
International Journal of Quantum Chemistry 91, 151-156 (2003).

52. *Phonon Softening, Chaotic Motion and Order-Disorder Transition in Sn/Ge(111)*
D. Farías, W. Kamiński, J. Lobo, J. Ortega, E. Hulpke, R. Pérez, F. Flores and E.G. Michel
Physical Review Letters **91**, 016103-(1-4) (2003).
53. *First-principles Simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance*
P. Jelínek, R. Pérez, J. Ortega and F. Flores
Physical Review B **68**, 085403-(1-4) (2003).
54. *Surface properties of chalcogen passivated GaAs(100)*
T.U. Kampen, D.R.T. Zahn, W. Braun, C. González, I. Benito, J. Ortega, L. Jurczyszyn, J.M. Blanco, R. Pérez and F. Flores
Applied Surface Science **212-213**, 850-855 (2003).
55. *Chalcogen passivation of GaAs(100) surfaces: theoretical study*
B. Szucs, Z. Hajnal, Th. Frauenheim, C. González, J. Ortega, R. Pérez and F. Flores
Applied Surface Science **212-213**, 861-865 (2003).
56. *Exchange-Correlation Energy in the orbital occupancy method: electronic structure of organic molecules*
R. Oszwaldowski, H. Vázquez, P. Pou, J. Ortega, R. Pérez and F. Flores
Journal of Physics: Condensed Matter **15**, S2665-S2678 (2003).
57. *Mechanical properties and electrical conductance of different Al nanowires submitted to an homogeneous deformation: a first-principles simulation*
P. Jelínek, R. Pérez, J. Ortega and F. Flores
Surface Science **566-568**, 13-23 (2004).
58. *Si-substitutional defects on the $\alpha - Sn/Si(111) - (\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ surface*
W. Kaminski, P. Jelínek, R. Pérez, F. Flores and J. Ortega
Applied Surface Science **234**, 286-291 (2004).
59. *Selenium passivation of GaAs(100): a combined experimental and theoretical study*
C. González, I. Benito, J. Ortega, L. Jurczyszyn, J.M. Blanco, R. Pérez, F. Flores, T.U. Kampen, D.R.T. Zahn and W. Braun
Journal of Physics: Condensed Matter **16**, 2187-2206 (2004).
60. *Schottky contacts on passivated GaAs(100) surfaces: Barrier height and reactivity*
T.U. Kampen, A. Schüller, D.R.T. Zahn, B. Biel, J. Ortega, R. Pérez and F. Flores
Applied Surface Science **234**, 341-348 (2004).
61. *Barrier formation at metal/inorganic interfaces: dipole formation and the Charge Neutrality Level*
H. Vázquez, F. Flores, R. Oszwaldowski, J. Ortega, R. Pérez and A. Kahn
Applied Surface Science **234**, 107-112 (2004).

62. *Dipole formation at metal/PTCDA interfaces: role of the Charge Neutrality Level*
H. Vázquez, R. Oszwaldowski, P. Pou, J. Ortega, R. Pérez, F. Flores and A. Kahn
Europhysics Letters **65**, 802-808 (2004).
63. *First principles simulations of STM images: from tunneling to the contact regime*
J.M. Blanco, C. González, P. Jelínek, J. Ortega, F. Flores and R. Pérez
Physical Review B **70** 085405-(1-9) (2004).
64. *Formation of atom wires on vicinal silicon*
C. González, P.C. Snijders, J. Ortega, R. Pérez, F. Flores, S. Rogge and H.H. Weitering,
Physical Review Letters **93** 126106-(1-4) (2004).
65. *Phonon Dynamics of the Sn/Ge(111)-(3×3) Surface*
D. Farías, W. Kamiński, J. Lobo, J. Ortega, E. Hulpke, R. Pérez, F. Flores and E.G. Michel
Applied Surface Science **237**, 86-92 (2004).
66. *Origin of contrast in STM images of oxygen on Pd(111) and its dependence on tip structure and tunnelling parameters*
J.M. Blanco, C. González, P. Jelínek, J. Ortega, F. Flores and R. Pérez
Physical Review B **71**, 113402-(1-4) (2005).
67. *Multi-center approach to the exchange-correlation interactions in ab initio tight-binding methods*
Pavel Jelínek, Hao Wang, James P. Lewis, Otto F. Sankey and José Ortega
Physical Review B **71**, 235101-(1-9) (2005).
68. *Van der Waals forces in the Local-Orbital Density Functional Theory*
M.A. Basanta, Y.J. Dappe, J. Ortega and F. Flores
Europhysics Letters **70**, 355-361 (2005).
69. *Metal-insulator transition in one-dimensional In-chains on Si(111): Combination of a soft shear distorsion and a double-band Peierls instability*
C González, J Ortega and F Flores
New Journal of Physics **7**, 100 1-7 (2005).
70. *Universal behaviour in the final stage of the breaking process for metal nanowires*
Pavel Jelínek, Rubén Pérez, José Ortega and Fernando Flores
Nanotechnology **16**, 1023-1028 (2005).
71. *Ga-induced atom wire formation and passivation of stepped Si(112)*
P.C. Snijders, S. Rogge, C. González, R. Pérez, J. Ortega, F. Flores and H.H. Weitering,
Physical Review B **72**, 125343-(1-12) (2005).
72. *Hydrogen Dissociation over Au Nanowires and the Fractional Conductance Quantum*
Pavel Jelínek, Rubén Pérez, José Ortega and Fernando Flores
Physical Review Letters **96**, 046803-(1-4) (2006).

73. *Soft phonon, Dynamical Fluctuations, and a Reversible Phase Transition: Indium Chains on Silicon*
C. González, F. Flores and J. Ortega
Physical Review Letters **96**, 136101-(1-4) (2006).
74. *Local-orbital occupancy formulation of density functional theory: Application to Si, C, and graphene*
Y.J. Dappe, R. Oszwaldowski, P. Pou, J. Ortega, R. Pérez and F. Flores
Physical Review B **73**, 235124-(1-12) (2006).
75. *González, Flores and Ortega reply*
C. González, F. Flores and J. Ortega
Physical Review Letters **97**, 189702 (2006).
76. *Weak chemical interaction and van der Waals forces between graphene layers: A combined density-functional and intermolecular perturbation theory approach*
Y.J. Dappe, M.A. Basanta, F. Flores and J. Ortega
Physical Review B **74**, 205434-(1-9) (2006).
77. *Optimized atomic-like orbitals for first-principles Tight-Binding Molecular Dynamics*
M.A. Basanta, Y.J. Dappe, P. Jelínek and J. Ortega
Computational Materials Science **39**, 759-766 (2007).
78. *Energy level alignment at metal/organic semiconductor interfaces: pillow effect, induced density of interface states and charge neutrality level.*
H. Vázquez, Y.J. Dappe, J. Ortega and F. Flores,
Journal of Chemical Physics **126**, 144703-(1-8) (2007).
79. *A unified model for metal/organic interfaces: IDIS, 'pillow' effect and molecular permanent dipoles.*
H. Vázquez, Y.J. Dappe, J. Ortega and F. Flores,
Applied Surface Science **254**, 378-382 (2007).
80. *Controlled Self-Organization of Atom Vacancies in Monoatomic Gallium Layers.*
P.C. Snijders, E.J. Moon, C. González, S. Rogge, J. Ortega, F. Flores and H.H. Weitering,
Physical Review Letters **99**, 116102-(1-4) (2007).
81. *Barrier formation at organic interfaces in a Cu(100)-benzenethiolate-pentacene heterostructure.*
M.G. Betti, A. Kanjilal, C. Mariani, H. Vázquez, Y.J. Dappe, J. Ortega and F. Flores,
Physical Review Letters **100**, 027601 (2008).
82. *Ab initio study of evolution of mechanical and transport properties of clean and contaminated Au nanowires along the deformation path.*
Pavel Jelínek, Rubén Pérez, José Ortega and Fernando Flores,
Physical Review B **77**, 115447 (2008).

83. *Mechanical and electrical properties of stretched clean and H-contaminated Pd-nanowires*
B. Pieczyrak, C. González, P. Jelínek, R. Pérez, J. Ortega and F. Flores,
Nanotechnology 19, 335711 (2008).
84. *An inversion technique for the calculation of embedding potentials*
O. Roncero, M.P. de Lara-Castells, P. Villarreal, F. Flores, J. Ortega, M. Paniagua and
A. Aguado
Journal of Chemical Physics 129, 184104 (2008).
85. *Fullerenes from aromatic precursors by surface-catalysed cyclodehydrogenation*
G. Otero, G. Biddau, C. Sánchez-Sánchez, R. Caillard, M.F. López, C. Rogero, F.J.
Palomares, N. Cabello, M.A. Basanta, J. Ortega, J. Mendez, A.M. Echavarren, R. Pérez,
B. Gómez-Lor, J.A. Martín-Gago,
Nature 454, 865-868 (2008).
86. *Initial Stages of the Contact between a Metallic Tip and Carbon Nanotubes*
C. González, J. Ortega, F. Flores, D. Martínez-Martín and J. Gómez-Herrero,
Physical Review Letters 102, 106801 (2009).
87. *Mechanism of Band Gap Opening across the Order-Disorder Transition of Si(111)4×1-In*
C. González, J.D. Guo, J. Ortega, F. Flores and H.H. Weiering,
Physical Review Letters 102, 115501 (2009).
88. *Modelling energy level alignment at organic interfaces and density functional theory*
F. Flores, J. Ortega, H. Vázquez,
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 11 8658-8675 (2009).
89. *Hydrogenation of semiconductor surfaces: Si-terminated cubic SiC(100) surfaces*
D.G. Trabada, F. Flores, J. Ortega,
PHYSICAL REVIEW B 80 075307 (2009).
90. *Density functional theory calculations and the induced density of interface states model
for noble metals/C-60 interfaces*
E. Abad, J. Ortega, F. Flores,
JOURNAL OF VACUUM SCIENCE & TECHNOLOGY B 27 2008-2011 (2009).
91. *Intermolecular interaction in density functional theory: Application to carbon nanotubes
and fullerenes*
Y.J. Dappe, J. Ortega, F. Flores,
PHYSICAL REVIEW B 79 165409 (2009).
92. *Weak dimers and soft phonons on the beta-SiC(100) surface*
D.G. Trabada, J. Ortega,
JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 21, 182003 (2009).

93. *Dipoles and band alignment for benzene/Au(111) and C-60/Au(111) interfaces*
E. Abad, J. Ortega, Y.J. Dappe, F. Flores,
APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING 95, 119-124 (2009).
94. *Reactivity indexes for different geometries of palladium leads*
S.C. Gómez-Carrillo, J. Ortega and P.G. Bolcatto
Journal of Physics: Conference Series 167 012062 (2009).
95. *Charging energy, self-interaction correction and transport energy gap for a nanogap organic molecular junction*
E. Abad, C. González, J.Ortega, F. Flores,
ORGANIC ELECTRONICS 11, 332-337 (2010).
96. *Barrier formation and charging energy for a variable nanogap organic molecular junction: a tip/C60 /Au(111) configuration.*
E. Abad, J. I. Martínez, J. Ortega, F. Flores.
JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER 22, 304007 1-6 (2010)
97. *C6H6/Au(111): interface dipoles, band alignment, charging energy and Van der Waals interaction*
E. Abad, Y. J. Dappe, J. I. Martínez, F. Flores, J. Ortega.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 134, 044701 1-8 (2011).
98. *Advances and applications in the FIREBALL ab initio tight-binding molecular-dynamics formalism*
James P. Lewis, Pavel Jelínek, José Ortega, Alexander A. Demkov, Daniel G. Trabada, Barry Haycock, Hao Wang, Gary Adams, John K. Tomfohr, Enrique Abad, Hong Wang and David A. Drabold
PHYSICA STATUS SOLIDI B 248, 1989-2007 (2011)
Review Article.
99. *Simulating the organic-molecule/metal interface TCNQ/Au(111)*
José I. Martínez, Enrique Abad, Fernando Flores and José Ortega
PHYSICA STATUS SOLIDI B 248, 2044-2049 (2011)
100. *Failure of potassium dimer formation on the β -SiC(100)-c(4 \times 2) surface*
Barry Haycock, José Ortega and James P. Lewis
PHYSICA STATUS SOLIDI B 248, 2072-2075 (2011)
101. *Charging energy and barrier height of pentacene on Au(111): a local-orbital hybrid-functional DFT approach.*
B. Pieczyrak, E. Abad, F. Flores and J. Ortega.
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 135, 084702 (2011).
102. *Barrier Height Formation for the PTCDA/Au(111) Interface.*
J.I. Martínez, E. Abad, F. Flores, J. Ortega, and G. Brocks
CHEMICAL PHYSICS 390 14-19 (2011).

103. *Giant alkali-induced lattice relaxation as the driving force of the insulating phase of alkali/Si(111):B*
L. Chaput, C. Tournier-Colletta, L.A. Cardenas, A. Tejada, B. Kierren, D. Malterre and Y. Fagot-Revurat, P. Le Fevre, F. Bertran and A. Taleb-Ibrahimi, D.G. Trabada, J. Ortega and F. Flores
PHYSICAL REVIEW LETTERS 107 187603 (2011).
104. *Metal/organic barrier formation for a C60/Au interface: from the molecular to the monolayer limit*
Enrique Abad, José Ortega and Fernando Flores
PHYSICA STATUS SOLIDI A 209, 636-646 (2012).
105. *Metallization of the K-overlayer on the β -SiC(100) c(4x2) surface*
Barry Haycock, Daniel G. Trabada, José Ortega, J.D. O'Mahony, J.P. Lewis
JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER 24, 485001 (2012).
106. *Theoretical characterization of the TTF/Au(111) interface: STM imaging, band alignment and charging energy.*
J. I. Martínez, E. Abad, C. González, F. Flores and J. Ortega
ORGANIC ELECTRONICS 13, 399-408 (2012).
107. *Improvement of STM Resolution with H-sensitized Tips*
J. I. Martínez, E. Abad, C. González, F. Flores and J. Ortega
PHYSICAL REVIEW LETTERS 108, 246102 (2012).
108. *Dynamical screening of the van der Waals interaction between graphene layers*
Y.J. Dappe, P.G. Bolcatto, J. Ortega and F. Flores
JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER 24, 424208 (2012).
109. *On the Organic Energy Gap Problem.*
F. Flores, E. Abad, J. I. Martínez, B. Pieczyrak and J. Ortega
JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER 25, 094007 (2013).
110. *Energy Level Alignment in Organic-Organic Heterojunctions: The TTF/TCNQ Interface*
Juan I. Beltrán, Fernando Flores, José I. Martínez and José Ortega,
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 117, 3888-3894 (2013).
111. *Calculation of non-adiabatic coupling vectors in a local-orbital basis set*
Enrique Abad, James P. Lewis, Vladmír Zobac, Prokop Hapala, Pavel Jelínek and José Ortega,
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 138, 154106 (2013).
112. *Barrier Height Formation in Organic Blends / Metal Interfaces: Case of (TTF-TCNQ) / Au(111)*
José I. Martínez, Enrique Abad, Juan I. Beltrán, Fernando Flores and José Ortega,
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 139, 214706 (2013).

113. *Nonadiabatic ensemble simulations of cis-stilbene and cis-azobenzene photoisomerization*
Amanda J. Neukirch, Logan C. Shamberger, Enrique Abad, Barry J. Haycock, Hong Wang, José Ortega, Oleg V. Prezhdo, and James P. Lewis,
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 10, 14-23 (2014).
114. *Statistical Analysis of Stretched Aluminum Nanowires*
Enrique Abad, César González, José I. Martínez, Fernando Flores and José Ortega,
JOURNAL OF NANOPARTICLE RESEARCH 16, 2262 (2014).
115. *The Role of Charge Transfer in the Energy Level Alignment at the Pentacene/C60 Interface*
J.I. Beltrán, F. Flores and J. Ortega,
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 16, 4268-4274 (2014).
116. *FIREBALL/AMBER: An efficient local-orbital DFT QM/MM method for biomolecular systems*
Jesús I. Mendieta-Moreno, Ross C. Walker, James P. Lewis, Paulino Gómez-Puertas, Jesús Mendieta and José Ortega,
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 10, 2185-2193 (2014).
117. *Imaging Molecular Orbitals of PTCDA on Graphene on Pt(111): Electronic Structure by STM and First-Principles Calculations*
Antonio J. Martínez-Galera, Nicoleta Nicoara, José I. Martínez, Yannick J. Dappe, José Ortega and José M. Gómez-Rodríguez,
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 118, 12782-12788 (2014).
118. *Si dielectric function in a local basis representation: Optical properties, local field effects, excitons and stopping power*
M. Gómez, P. González, J. Ortega and F. Flores
PHYSICAL REVIEW B 90, 205210-(01-10) (2014).
119. *Ultrafast Atomic Diffusion Inducing a Reversible $(2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3})R30^\circ \leftrightarrow (\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ Transition on Sn/Si(111):B*
W. Srour, Daniel G. Trabada, J.I. Martínez, F. Flores, J. Ortega, M. Abuín, Y. Fagot-Revurat, B. Kierren, A. Taleb-Ibrahimi, D. Malterre and A. Tejada.
PHYSICAL REVIEW LETTERS 114, 196101-(1-5) (2015).
120. *Photo-induced reactions from efficient molecular dynamics with electronic transitions using the FIREBALL local-orbital density functional theory formalism*
Vladimír Zobac, James P. Lewis, Enrique Abad, Jesús I. Mendieta-Moreno, Prokop Hapala, Pavel Jelínek and José Ortega.
JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER 27, 175002-(1-11) (2015).

121. *A practical Quantum Mechanics Molecular Mechanics method for the dynamical study of reactions in biomolecules.*
Jesús I. Mendieta-Moreno, Iñigo Marcos-Alcalde, Daniel G. Trabada, Paulino Gómez-Puertas, José Ortega and Jesús Mendieta.
Special issue: *Combined Quantum Mechanical and Molecular Mechanical Modelling of Biomolecular Interactions.*
in *ADVANCES IN PROTEIN CHEMISTRY AND STRUCTURAL BIOLOGY* 100, pp. 67-88 (2015).
Editor: Tatyana Karabancheva-Christova. Academic Press (2015).
122. *Chemical Interaction, Space-Charge Layer, and Molecule Charging Energy for a TiO₂/TCNQ Interface.*
José I. Martínez, Fernando Flores, José Ortega, Sylvie Rangan, Charles Ruggieri, and Robert Bartynski.
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 119, 22086-22091 (2015).
123. *Densely Packed ZnTPPs Monolayer on the Rutile TiO₂-(1×1) Surface: Adsorption Behavior and Energy Level Alignment.*
Sylvie Rangan, Charles Ruggieri, Robert Bartynski, José I. Martínez, Fernando Flores, and José Ortega.
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 120, 4430-4437 (2016).
124. *Quantum Mechanics / Molecular Mechanics Free Energy Maps and Nonadiabatic Simulations for a Photochemical Reaction in DNA: Cyclobutane Thymine Dimer.*
Jesús I. Mendieta-Moreno, Daniel G. Trabada, Jesús Mendieta, James P. Lewis, Paulino Gómez-Puertas, and José Ortega.
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS 7, 4391-4397 (2016).
125. *Two-step ATP-driven Opening of Cohesin Head.*
I. Marcos-Alcalde, J.I. Mendieta-Moreno, B. Puisac, M.C. Gil-Rodríguez, M. Hernández-Marcos, D. Soler-Polo, F.J. Ramos, J. Ortega, J. Píe, J. Mendieta and P. Gómez-Puertas.
SCIENTIFIC REPORTS 7, 3266 (2017).
126. *Unveiling universal trends for the energy level alignment in organic/oxide interfaces*
José I. Martínez, Fernando Flores, José Ortega, Sylvie Rangan, Charles M. Ruggieri and Robert A. Bartynski.
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 19, 24412-24420 (2017).
127. *Adsorption Geometry and Energy Alignment at the PTCDA/TiO₂-(110) Interface.*
Sylvie Rangan, Charles Ruggieri, Robert Bartynski, José I. Martínez, Fernando Flores, and José Ortega.
THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 122, 534-542 (2018).

128. *DFT Molecular Dynamics and Free Energy Analysis of a Charge Density Wave Surface System.*
Daniel G. Trabada, Jesús I. Mendieta-Moreno, Diego Soler-Polo Fernando Flores, and José Ortega.
APPLIED SURFACE SCIENCE 479, 260-264 (2019).
129. *Proton Transfer in Guanine-Cytosine Base Pairs in B-DNA.*
Diego Soler-Polo, Jesús Mendieta-Moreno, Daniel G. Trabada, Jesús Mendieta and José Ortega.
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 15, 6984-6991 (2019).
130. *Coupled Sublattice Melting and Charge-Order Transition in Two Dimensions.*
T. S. Smith, F. Ming, D. G. Trabada, C. González, D. Soler-Polo, F. Flores, J. Ortega, H. H. Weitering.
PHYSICAL REVIEW LETTERS 124, 097602 (2020).

5.3 Revistas españolas

1. *Física General para estudiantes ciegos: I Método y recursos didácticos*
J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco, B. Sánchez y C. Sánchez
Revista Española de Física 4, 2 45–52 (1990).
2. *Física General para estudiantes ciegos: II Resultados*
J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco, B. Sánchez y C. Sánchez
Revista Española de Física 4, 3 68 (1990).

5.4 Libros de congresos y monografías

1. *Initial stages of Schottky barrier formation : Ag on GaAs(110)*
J. Ortega, J. Sánchez-Dehesa y F. Flores
Proceedings of the 19th International Conference on the Physics of Semiconductors, p. 641-644
Editor: W. Zawadzki, Institute of Physics, Polish Academy of Sciences (1988).
2. *On the formation of metal-semiconductor interfaces: the case of K on GaAs(110)*
J. Ortega y F. Flores
Metallization and metal-semiconductor interfaces, p. 439-447
Editor: I.P. Batra, Plenum Press (1988).
3. *Theoretical models on the formation of semiconductor interface barriers*
F. Flores, J. Ortega y R. Pérez
Semiconductor Superlattices and Interfaces, p. 39-57
Editores: A. Stella y L. Miglio, North-Holland, Amsterdam (1993).
4. *Dynamic interaction of ions with condensed matter using a LCAO approach*
F. Flores, J.J. Dorado, F.J. García-Vidal, J. Ortega y R. Monreal
Ionization of Solids by Heavy Particles, p. 11–18
Editor: R.A. Baragiola, Plenum Press, New York, (1993).
5. *A LCAO approach to the calculation of electronic properties of materials*
P. Pou, R. Pérez, J. Ortega, y F. Flores
Tight-Binding Approach to Computational Materials Science, Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 491, p. 45-56 (1998).
6. *Exchange–correlation energy as a function of the orbital occupancies*
P. Pou, R. Oszwaldowski, R. Pérez, F. Flores y J. Ortega
Electron Correlations and Materials Properties 2, p. 253-61
Editor: A. Gonis, N. Kioussis, M. Ciftan, Kluwer Academic/Plenum Publishers (2003).

5.5 Otras publicaciones

1. *Física general para estudiantes ciegos y deficientes visuales: diseño, construcción, experimentación y evaluación de material didáctico*
J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco, B. Sánchez y C. Sánchez
Integración, p. 23-35, 6 de Agosto de 1991.
2. *Una alternativa para la enseñanza de la física para los alumnos ciegos y amblíopes: modelos y recursos didácticos*
J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco, B. Sánchez y C. Sánchez
Boletín del Instituto de Ciencias de la Educación (UAM), p. 63-72, Diciembre de 1989.

6. Proyectos de investigación subvencionados

TÍTULO DEL PROYECTO: *Modelización de Materiales Complejos: Biomoléculas y Sistemas Bidimensionales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad, Proyecto MAT2017-88258-R

DURACIÓN DESDE: 01/2018 HASTA: 12/2021.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Virus as molecular containers: transport, delivery and nano-reactors*

ENTIDAD FINANCIADORA: Instituto de Física de la Materia Condensada (IFIMAC)

DURACIÓN DESDE: 2016 HASTA: 2019.

INVESTIGADORES PRINCIPALES: Pedro J. de Pablo, Rafael Delgado, José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Modelización de Materiales a Escala Nanométrica*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Economía y Competitividad, Proyecto MAT2014-59966-R

DURACIÓN DESDE: 01/2015 HASTA: 12/2017.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Simulación de primeros principios de materiales complejos: interfaces de materiales orgánicos, fotosíntesis y nanocatálisis*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación, Proyecto FIS2010-16046

DURACIÓN DESDE: 01/2011 HASTA: 12/2013.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy (CODECS)*. COST Action: European Cooperation in Science and Technology.

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea. CMST Action CM1002

DURACIÓN DESDE: 07/2010 HASTA: 05/2014.

José Ortega Mateo (director del grupo asociado de la UAM).

TÍTULO DEL PROYECTO: *Desde Átomos hasta Virus (NanoOjetos-CM)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid, S2009/MAT-1467

DURACIÓN DESDE: 01/2010 HASTA: 01/2014

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo

TÍTULO DEL PROYECTO: *Modelling of electronic processes at interfaces in organic-based electronic devices (MINOTOR)*

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea, FP7-NMP3-SL-2009-228424

DURACIÓN DESDE: 06/2009 HASTA: 05/2012

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores / José Ortega

TÍTULO DEL PROYECTO: *Simulación de primeros principios de nanomateriales*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia, Proyecto MAT2007-60966

DURACIÓN DESDE: 10/2007 HASTA: 12/2010.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Propiedades mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: síntesis, caracterización y modelización.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid, Proyecto S-0505/MAT/0303

DURACIÓN DESDE: 01/2006 HASTA: 01/2010.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Transporte electrónico en nanoestructuras: nanocontactos, nanotubos y moléculas orgánicas.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia, Proyecto NAN2004-09183-C10-07

DURACIÓN DESDE: 10/2005 HASTA: 10/2009.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Simulación de primeros principios de materiales complejos: materiales moleculares, moléculas orgánicas en interfases y nanoestructuras de átomos metálicos en superficies de semiconductores*

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia, Proyecto MAT2004-01271

DURACIÓN DESDE: 12/2004 HASTA: 12/2007.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Moléculas orgánicas en interfases.*

ENTIDAD FINANCIADORA: Comunidad de Madrid / FEDER, Proyecto 07N/0050/2001

DURACIÓN DESDE: 2002 HASTA: 2003.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Ortega Mateo.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Simulación de sistemas complejos en una base de orbitales localizados: moléculas orgánicas en interfases y transiciones de fase en superficies de semiconductores.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.I.C.Y.T., Proyecto MAT2001-0665

DURACIÓN DESDE: 2002 HASTA: 2005.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Development, validation and application of hybrid atomistic modelling schemes*

ENTIDAD FINANCIADORA: U.E., Proyecto Europeo HPRN-CT-2000-00154

DURACIÓN DESDE: 2000 HASTA: 2003.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Designing Inorganic/Organic Devices*

ENTIDAD FINANCIADORA: U.E., Proyecto Europeo HPRN-CT-1999-00164

DURACIÓN DESDE: 2000 HASTA: 2003.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Nuevos conceptos para un incremento significativo de los dispositivos fotovoltaicos: la supercélula solar*

ENTIDAD FINANCIADORA: U.E. (FEDER, 2FD97-0332C03/02)

DURACIÓN DESDE: 1998 HASTA: 2001.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Propiedades electrónicas de sistemas complejos: Nanocatálisis, nanocontactos, STM BEEM y transferencia de carga entre iones y la materia condensada.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.I.C.Y.T., proyecto PB-97-0028

DURACIÓN DESDE: 1998 HASTA: 2000.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Atomic Scale Simulation.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.E.E. (Proyecto CHRX-C793-0134)

DURACIÓN DESDE: 1993 HASTA: 1995.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Propiedades electrónicas de las interfases de metales y semiconductores.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.I.C.Y.T., (PB-92-0168-C)

DURACIÓN DESDE: 1993 HASTA: 1998.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Ab initio calculation of complex processes in materials.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.E.E.

DURACIÓN DESDE: 1993 HASTA: 1997.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Volker Heine.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Propiedades electrónicas de las interfases de semiconductores.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.I.C.Y.T. (PB-89-0165)

DURACIÓN DESDE: 1992 HASTA: 1993.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Initial steps of the formation of Schottky barriers on III-V semiconductors.*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.E.E. , proyecto SC1-CT-91-0691

DURACIÓN DESDE: 1991 HASTA: 1992.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Propiedades de interfases de semiconductores*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.I.C.Y.T. , proyecto MAT-88-0544

DURACIÓN DESDE: 1988 HASTA: 1991.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Experimentación, evaluación e implantación de recursos pedagógicos sencillos para el desarrollo de la asignatura de física aplicada*

ENTIDAD FINANCIADORA: O.N.C.E.

DURACIÓN DESDE: 1987 HASTA: 1988.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Sánchez.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Estudio de los estados electrónicos en interfases semiconductor-semiconductor*

ENTIDAD FINANCIADORA: C.E.E. , proyecto N5.ST2J-0254-7-E (EDB)

DURACIÓN DESDE: 1987 HASTA: 1990.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Fernando Flores.

TÍTULO DEL PROYECTO: *Definición y diseño de recursos pedagógicos sencillos para el desarrollo de la asignatura de física aplicada*

ENTIDAD FINANCIADORA: O.N.C.E.

DURACIÓN DESDE: 1986 HASTA: 1986.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Sánchez.

7. Congresos y Workshops Internacionales

7.1 Ponencias Invitadas impartidas personalmente: Congresos

1. 12TH GENERAL CONFERENCE OF THE CONDENSED MATTER DIVISION OF THE EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY
Praga (Checoslovaquia), Abril (1992)
Chemisorption of metals or electronegative atoms on GaAs
J. Ortega, F.J. García-Vidal, R. Pérez, R. Rincón y F. Flores.
2. 1999 CENTENNIAL MEETING OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY
Atlanta, GA (EEUU), Marzo (1999)
Electron correlation effects at semiconductor surfaces: Si(111)-5×5, Si(111)-7×7 and Sn/Ge(111)-3×3
J. Ortega
3. Ψ_k 2000 CONFERENCE
Schwäbisch Gmünd, Alemania, Agosto (2000)
Electron correlation effects and dynamical fluctuations at semiconductor surfaces: Sn/Ge(111) and Sn/Si(111)
J. Ortega, R.Pérez and F.Flores
4. 9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE FORMATION OF SEMICONDUCTOR INTERFACES
Madrid (España), 15–19 de Septiembre 2003.
Molecular Dynamics Simulations of the α -Sn/Ge(111) surface: phonon softening, chaotic motion and order-disorder transition
J. Ortega.
5. 10TH SYMPOSIUM ON SURFACE PHYSICS
Praga (Czech Republic), 10–15 de Julio 2005.
One dimensional chains of metal atoms on Si: In/Si(111)-4x1 and Ga/Si(112)-6x1
J. Ortega.
6. INTERNATIONAL MEETING ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS AND CHEMISTRY, IMAMPC-2010
Madrid (España), 29 Junio – 2 Julio, 2010.
Analysis of the formation of Metal/Organic Interfaces and Nanocontacts using Density Functional Theory
J. Ortega.

7. INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE FORMATION OF SEMICONDUCTOR INTERFACES, ICFSI-13
Praga (República Checa, 3 – 8 Julio, 2011).
Energy level alignment at the molecule-metal interface
J. Ortega.

7.2 Ponencias Invitadas impartidas personalmente: Workshops

8. WORKSHOP ON ELECTRON SPECTROSCOPIES AND STRONGLY CORRELATED ELECTRON SYSTEMS
Ávila, España, Julio (2000)
Theoretical analysis of the $\alpha - (\sqrt{3} \times \sqrt{3}) \leftrightarrow (3 \times 3)$ transition in the Sn/Ge(111) surface
J. Ortega, R.Pérez and F.Flores
9. TENTH WORKSHOP ON SURFACE DYNAMICS: PHONONS, ADSORBATE VIBRATIONS AND DIFFUSION
El Escorial, (España), 13–17 de Junio 2001.
Surface soft phonon and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ phase transition in Sn/Ge(111) and Sn/Si(111)
J. Ortega, R. Pérez y F. Flores.
10. SECOND WORKSHOP ON ELECTRON CORRELATIONS AND MATERIALS PROPERTIES
Rodas, (Grecia), 24–29 de Junio 2001.
Electron exchange-correlation energy as a function of the orbital occupancies: Implementation on first-principles local-orbital methods
J. Ortega
11. LOCALIZATION - LOW DIMENSIONAL STRUCTURES
Marburg, (Alemania), 1–3 de Julio de 2002.
Many-body and dynamical effects at semiconductor surfaces
J. Ortega
12. WORKSHOP ON COMPUTATIONAL MATERIALS AND MOLECULAR ELECTRONICS
Austin (Texas, EEUU), 20–22 de Octubre de 2005.
Van der Waals Interactions in Local Orbital Density Functional Theory
J. Ortega
13. COMMETH2006: COMPUTATIONAL METHODS FOR 1ST-PRINCIPLES CALCULATIONS OF COMPLEX SYSTEMS
Madrid (Spain), 26–27 de Octubre de 2006.
First-principles Simulations of reversible phase transitions in Semiconductor Surfaces
J. Ortega

14. SPLDS-08: STATISTICAL PHYSICS AND LOW DIMENSIONAL SYSTEMS
Nancy (Francia), 21–23 de Mayo de 2008.
The In/Si(111)-4x1 ↔ 8x2 reversible phase transition (plenary talk)
J. Ortega
15. LARGE SCALE SIMULATIONS IN MATERIALS SCIENCE AND BIOPHYSICS
A Conference Honoring the Scientific Achievements of O. F. Sankey
Tempe, Arizona (EEUU), 11 Enero, 2011.
Simulating Organic Molecule /Metal and Organic/Organic Systems
J. Ortega
16. CODECS (Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy) COST
WORKSHOP
Porto, (Portugal), 4-8 Mayo, 2012
Density Functional Theory Molecular Dynamics for Complex Problems
J. Ortega
17. FIREBALL WORLD CONGRESS DEVELOPERS MEETING
Orlando (Florida, EEUU), 9-21 Junio, 2012
Density Functional Theory Molecular Dynamics for Complex Problems
J. Ortega
18. BIOMOLECULES: FROM PHYSICS TO NANOTECHNOLOGY
Madrid, (España), 6 Junio, 2013
First-principles Simulations of Biomolecules
J. Ortega
19. 7TH INTERNATIONAL WORKSHOP ON SURFACE PHYSICS, IWSP-2015
Trzebnica, (Polonia), 21-25 Junio, 2015
Reversible Phase Transitions and Dynamical Fluctuations on Semiconductor Surfaces
J. Ortega
20. GAME OF MATERIALS
Dubrovnik, (Croacia), 30 Octubre – 2 Noviembre, 2018
Modelling Reactions in Biomolecules
J. Ortega

7.3. Otras Comunicaciones

- Otras ponencias invitadas (impartidas por otro de los autores): 20 (aproximadamente).
- Otras presentaciones en congresos internacionales (orales o poster): 70 (aproximadamente).

8. Tesis Doctorales Dirigidas

TÍTULO: SIMULACIÓN DE REACCIONES EN BIOMOLÉCULAS CON QM/MM.

DOCTORANDO: Jesús Ignacio Mendieta Moreno

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias.

AÑO: 2017

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: FUNCIÓN DIELECTRICA DEL SILICIO EN UNA REPRESENTACIÓN LOCAL: PROPIEDADES ÓPTICAS, EFECTOS DE CAMPO LOCAL, EXCITÓN Y POTENCIA DE PÉRDIDAS.

DOCTORANDO: Máximo Gómez Flórez (codirigida con Fernando Flores Sintas)

Tutor: Pablo Guillermo González Espeso

UNIVERSIDAD: Universidad de Salamanca

AÑO: 2015

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: ENERGY LEVEL ALIGNMENT AND ELECTRON TRANSPORT THROUGH METAL/ORGANIC CONTACTS: FROM INTERFACES TO MOLECULAR ELECTRONICS

DOCTORANDO: Enrique Abad González (codirigida con Fernando Flores Sintas)

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias

AÑO: 2011

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude.

Premio Extraordinario de Doctorado.

Tesis seleccionada para publicación en la serie de libros “Springer Theses”

<http://www.springer.com/series/8790>

Tesis disponible on-line en: <http://hdl.handle.net/10486/7846>

TÍTULO: EFECTOS DINÁMICOS EN LA SUPERFICIE β -SiC(100)

DOCTORANDO: Daniel González Trabada

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias

AÑO: 2009

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: ANÁLISIS DE LA INTERACCIÓN VAN DER WAALS MEDIANTE TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD.

DOCTORANDO: Miguel Ángel Basanta Ramos (codirigida con Fernando Flores Sintas)

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias

AÑO: 2005

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

TÍTULO: MÉTODOS DFT Y STM DE PRIMEROS PRINCIPIOS PARA EL ESTUDIO DE SUPERFICIES SEMICONDUCTORAS CON ADSORBATOS: PASIVACIÓN, NANOHILOS Y TRANSICIONES DE FASE.

DOCTORANDO: César González Pascual (codirigida con Fernando Flores Sintas y Rubén Pérez Pérez)

UNIVERSIDAD: Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias

AÑO: 2006

CALIFICACIÓN: Sobresaliente cum laude

9 Patentes

AUTORES (P.O. DE FIRMA): A. Luque, F. Flores, A. Marti, J.C. Conesa, P. Wahnnon, J. Ortega, C. Tablero, R. Perez, L. Cuadra.

TÍTULO: *Intermediate band semiconductor photovoltaic solar cell.*

SOLICITUD DE PATENTE EUROPEA NO.: 00936909

Año: 2000

ENTIDAD TITULAR: Universidad Politécnica de Madrid, Universidad Autónoma de Madrid, Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

PAISES: 25 países europeos, EEUU.

AUTORES (P.O. DE FIRMA): C. Sánchez, J. Sevilla, J. Ortega, F. Blanco y B. Sánchez

TÍTULO: “Materiales para la enseñanza de la Física para alumnos invidentes o amblíopes y para alumnos de EGB y BUP”

Nº DE REGISTRO: 121.558

Año: 1990

ENTIDAD TITULAR: Universidad Autónoma de Madrid

PAISES: España

Código Libre

TÍTULO: FIREBALL

REPOSITORIO: <https://fireball-qmd.github.io>

LICENCIA: GPLv3

DESCRIPCIÓN: Conjunto de programas para la simulación de materiales a escala atómica mediante simulaciones de Dinámica Molecular Cuántica. En este método la estructura electrónica del material se determina mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), usando una base de orbitales numéricos de tipo atómico (orbitales *Fireball*).

AUTORES: Otto F. Sankey, James P. Lewis, José Ortega, Alexander A. Demkov, Pavel Jelínek, Daniel G. Trabada y otros.

10. Cursos y seminarios impartidos

1. Ponente en el Curso LA FÍSICA COMPUTACIONAL EN LA MATERIA CONDENSADA
Curso de la Universidad de La Laguna
La Laguna, España, 9-11 Junio de 1997
2. Ponente en el ENCUENTRO SOBRE “FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA: APLICACIONES DE LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD Y OTROS MÉTODOS DE LA QUÍMICA CUÁNTICA”
XV Cursos de Verano de la Universidad de Cantabria
Laredo, España, 29 de Junio - 2 de Julio de 1999
3. Conferencia: *Introducción a la Dinámica Molecular Cuántica*
Universidad de La Laguna (Tenerife), 4 de Octubre de 1994.
4. Conferencia: *El enlace puente de Hidrogeno: Un Modelo “Tight-Binding” de Primeros Principios*
Universidad de La Laguna (Tenerife), 6 de Octubre de 1994.
5. Conferencia: *First principles simulations of hydrogen-bonded systems: water*
Friedrich Schiller Universität, Jena (Alemania), 29 de Junio de 1995.
6. Ponente en el DIODE-TRAINING WORKSHOP : STM, AFM AND THEORETICAL SIMULATIONS
Universidad Autónoma de Madrid
Madrid, España, 22 - 26 de Abril de 2002
7. Conferencia: *Dynamical fluctuations and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ transition in $\alpha - Sn/Ge(111)$ and $\alpha - Sn/Si(111)$*
Donosti International Physics Center, San Sebastian 8 de Noviembre 2002.
8. Conferencia: *First-principles study of the $In/Si(111)-4 \times 1 \leftrightarrow 8 \times 2$ reversible phase transition*
University of Texas, Austin (Texas, EEUU), 25 de Octubre 2005.
9. Conferencia: *Indium Chains on $Si(111)$: first-principles study of a reversible phase transition*
Universidad de La Laguna (Tenerife), Noviembre de 2006.
10. *Colloquium: Reversible Phase Transitions at Semiconductor Surfaces*
WVNano, West Virginia University (Morgantown, West Virginia, EEUU), 31 de Marzo 2009.

11. *Conferencia: QM/MM Dynamical Analysis of Enzymatic and Photochemical Reactions in Biomolecules*
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences (Prague, Czech Republic), 02 de Octubre de 2017.

11. Becas, ayudas y premios recibidos

- Beca del Plan de Formación del Personal Investigador del Ministerio de Educación y Ciencia (Plan Nacional de Nuevos Materiales)
1 de Enero de 1988 - 30 de Septiembre de 1990
Universidad Autónoma de Madrid.
- Beca postdoctoral *MEC-Fulbright* en los Estados Unidos
1 de Octubre de 1992 - 31 de Julio de 1993
Arizona State University (EEUU).
- Beca postdoctoral del programa de las Comunidades Europeas *Capital Humano y la Movilidad*
1 de Septiembre de 1993 - 31 de Diciembre de 1994
University of Cambridge (Reino Unido).
- Ayuda para Estancias de movilidad de profesores e investigadores seniors en centros extranjeros de enseñanza superior e investigación
1 de Agosto de 2008 - 31 de Julio 2009
West Virginia University (EEUU).
- Premio Extraordinario de Doctorado
Universidad Autónoma de Madrid (1991).

12. Otros Méritos

12.1 Participación en comités y representaciones internacionales

- Representante español en la **Network Management Board**, de la *network* de la Unión Europea: *Ab initio (from electronic structure) calculation of complex processes in materials*, correspondiente al Programa *Human Capital and Mobility*.
Fechas: 1995-97.
- Miembro del **Advisory Committee** del Programa: *Electronic Structure Calculations for Elucidating the Complex Atomistic Behaviour of Solid and Surfaces (STRUC- Ψ_k)*.
European Science Foundation.
Fechas: 1998-01.
- Miembro del **Fireball Committee**
- Miembro del **Comité Asesor Científico de Preselección del Concurso SPMAGE07**
- Miembro del Ψ_k **Scientific Advisory Committee**.
Fechas: 2010-15.

12.2 Evaluación de la actividad investigadora

Tramos (sexenios) evaluados positivamente por la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora:

- AÑOS: 1988–1993 (ambos inclusive)
- AÑOS: 1994–1999 (ambos inclusive)
- AÑOS: 2000–2005 (ambos inclusive)
- AÑOS: 2006–2011 (ambos inclusive)
- AÑOS: 2012–2017 (ambos inclusive)

12.3 Evaluación de la actividad docente

Tramos (quinquenios) evaluados positivamente por la Comisión de Evaluación de los Servicios Docentes de la Universidad Autónoma de Madrid:

- AÑOS: 1987–1991 (ambos inclusive)
- AÑOS: 1992–1996 (ambos inclusive)
- AÑOS: 1997–2001 (ambos inclusive)
- AÑOS: 1992–2006 (ambos inclusive)
- AÑOS: 2007–2011 (ambos inclusive)
- AÑOS: 2012–2016 (ambos inclusive)

12.4 Evaluador

- DE ARTÍCULOS EN LAS REVISTAS INTERNACIONALES:
 - Physical Review Letters
 - Physical Review B
 - Surface Science
 - Applied Surface Science
 - Journal of Computational Physics
 - Computational Materials Science
 - Physica Status Solidi
 - The Journal of Physical Chemistry
 - International Journal of Computer Mathematics
 - The Journal of Vacuum Science and Technology A
 - Journal of Applied Physics
 - Nature
 - Molecules
 - Journal of Computational Chemistry
 - Catalysis Science & Technology
 - Molecular Physics

- DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN:

- para el Department of Energy (EEUU)
- para la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Argentina.
- para la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP), España.
- para L'Agence Nationale de la Recherche (ANR), Francia.
- para la Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) (German Research Foundation), Alemania.
- para la Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), Holanda.
- para la Consejería de Industria e Innovación, Gobierno de Aragón, España.

12.5 Estancias en otros centros de investigación

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

CENTRO: West Virginia University

LOCALIDAD: Morgantown, WV PAÍS: EEUU AÑO:2008-09 DURACION: Doce meses

TEMA: Investigación de la fotosíntesis mediante técnicas de simulación de primeros principios

CLAVE: O (Estancia de movilidad de profesores en centros extranjeros)

CENTRO: *Motorola Inc.*

LOCALIDAD: Mesa (Arizona) PAÍS: EEUU AÑO:1998 (Julio) DURACION: Un mes

TEMA: Desarrollo del código de simulación de materiales "FIREBALL2000". CLAVE: I

CENTRO: University of Cambridge

LOCALIDAD: Cambridge PAÍS: Reino Unido AÑO:1993-94 DURACION: Dieciseis meses

TEMA: Simulación de primeros principios de procesos atómicos en minerales. CLAVE: P

CENTRO: Arizona State University

LOCALIDAD: Tempe PAÍS: EEUU AÑO:1992-93 DURACION: Diez meses

TEMA: Simulaciones de primeros principios de diversos materiales. CLAVE: P

CENTRO: Scuola Normale Superiore de Pisa

LOCALIDAD: Pisa PAÍS: Italia AÑO:1989 (Noviembre) DURACION: Un mes

TEMA: La formación de la interfase metal-semiconductor. CLAVE: D

CENTRO: L.E.P.E.S. (perteneciente al C.N.R.S.)

LOCALIDAD: Grenoble PAÍS: Francia AÑO:1988 (Junio) DURACION: Un mes

TEMA: La formación de la interfase metal-semiconductor. CLAVE: D

12.6 Experiencia en organización de actividades de I+D

TÍTULO: Ψ_k Network Conference: *Ab initio (from electronic structure) calculation of complex processes in materials*

TIPO DE ACTIVIDAD: Miembro del *Program Committee*

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 18-21 Septiembre, 1996.

TÍTULO: Ψ_k 2000 Conference

TIPO DE ACTIVIDAD: Miembro del *Programme Committee*

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 22-26 Agosto, 2000.

TÍTULO: *9th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces*

TIPO DE ACTIVIDAD: Miembro del *Organising Committee*

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 15-19 Septiembre, 2003.

TÍTULO: *Second International Fireball Workshop: Recent developments in first-principles simulations in biological, chemical and physical systems*

TIPO DE ACTIVIDAD: Co-chairperson

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 17-19 Diciembre, 2006.

TÍTULO: *Molecular Photoreactivity on Metal-Oxide Surfaces from First-Principles*

TIPO DE ACTIVIDAD: Co-chairman, Miembro del *Organising Committee* y del *Scientific Committee*

ÁMBITO:

Internacional

FECHA: 4-5 Diciembre, 2009.

TÍTULO: *Large Scale Simulations in Materials Science and Biophysics, A Conference Honoring the Scientific Achievements of O. F. Sankey*

TIPO DE ACTIVIDAD: Co-organizador.

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 11 Enero 2011.

TÍTULO: Ψ_k 2015 Conference

TIPO DE ACTIVIDAD: Program Committee Member.

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 11 Septiembre 2015.

TÍTULO: *15th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces (ICFSI-15).*

Hiroshima (Japan).

TIPO DE ACTIVIDAD: International Program Committee Member.

ÁMBITO: Internacional

FECHA: 15-20 Noviembre 2015.

12.7 Coordinador Programas de Doctorado

- COORDINADOR DEL PROGRAMA DE DOCTORADO en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología.
Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Murcia y Universidad de Oviedo.
FECHAS: Septiembre de 2012 - Octubre de 2013.
- COORDINADOR DEL PROGRAMA DE DOCTORADO en Física de la Materia Condensada, Nanociencia y Biofísica.
Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Murcia y Universidad de Oviedo.
FECHAS: Octubre de 2013 - Noviembre 2015.

12.8 Acreditación Catedrático de Universidad

- Certificado de Acreditación para poder participar en concursos de acceso para el Cuerpo de Catedráticos de Universidad.
Consejo de Universidades.
FECHA: 5 de Octubre de 2010

12.9 Exposiciones

1^{er} Salon Européen des Techniques pour Aveugles et Ambliopes

Palais de l'UNESCO, París (Francia)
Noviembre de 1988.

Diligencia de refrendo de Curriculum

El abajo firmante D. José Ortega Mateo se responsabiliza de la veracidad de los datos contenidos en el presente *Curriculum*, comprometiéndose a aportar, en su caso, las pruebas documentales que le sean requeridas.

Madrid, Febrero de 2019

Fdo. José Ortega Mateo