

Dr. Javier Fdez. Sanz es Catedrático de Química Física de la Universidad de Sevilla y Director del Grupo de Química Teórica y Simulación de Materiales. Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad de Zaragoza (España, 1982), ha sido Profesor Ayudante en la Universidad de Zaragoza (3 años), Maitre Assistant en la Universidad de Pau (Francia, 3 años), y Profesor Visitante en la Universidad de Stanford (California, EE.UU., 2 años). Visiting Scholar en las Universidades de Cambridge (Reino Unido), North Carolina State (NCSU, Raleigh, EE. UU.), Paul Sabatier (Toulouse, Francia) y Berkeley (California, EE. UU.). Ha sido líder de más de 20 proyectos financiados por agencias locales, nacionales y europeas. También ha desarrollado proyectos colaborativos financiados por la industria (IBM, REPSOL). Ha supervisado 15 Ph.D. proyectos. Fue vicedecano de la Facultad de Química de la USE y actualmente es miembro de la Real Academia de Ciencias de Sevilla. Sus intereses de investigación se centran en la ciencia computacional de los materiales, en particular la catálisis heterogénea, los materiales fotovoltaicos y los fenómenos de transferencia de energía, carga y masa. Su experiencia cubre métodos teóricos basados en la teoría de la mecánica cuántica y la mecánica estadística, utilizando tanto primeros principios como simulaciones de dinámica molecular. Es coautor de más de 240 artículos, con un número h de 53 y más de 10000 veces citado según la base de datos Web of Science. ID del investigador: E-1368-2012, ORCID: 0000-0003-2064-7007. Enlace de Google Académico: [Google Scholar link](#).

Algunos artículos en coautoría recientes y relevantes seleccionados son:

- Catalytic activity of PtCu intermetallic compound for CO oxidation: a theoretical insight.
Catalysis Today **2021**. DOI: [10.1016/j.cattod.2020.12.007](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.12.007)
- High-Throughput Screening of the Thermoelastic Properties of Ultrahigh-Temperature Ceramics
ACS Appl. Mater. Interfaces **2021**, 13, 25, 29843–29857.
<https://doi.org/10.1021/acscami.1c08832>
- Understanding the active sites of boron nitride for CWPO: an experimental and computational approach
Chem. Eng. J. **2021**, 406, 1268462. DOI: [10.1016/j.cej.2020.126846](https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.126846)
- Water–Gas Shift Reaction on K/Cu(111) and Cu/K/TiO₂(110) Surfaces: Alkali Promotion of Water Dissociation and Production of H₂
ACS Catal. **2019**, 9, 10751-10760. DOI: [10.1021/acscatal.9b03922](https://doi.org/10.1021/acscatal.9b03922)
- Nanoimaging of Organic Charge Retention Effects: Implications for Nonvolatile Memory, Neuromorphic Computing, and High Dielectric Breakdown Devices
ACS Appl. Nano Mater. **2019**, 2, 4711-4716. DOI: [10.1021/acsanm.9b01182](https://doi.org/10.1021/acsanm.9b01182)
- Graphene Translucency and Interfacial Interactions in the Gold/Graphene/SiC System
J. Phys. Chem. Lett. **2018**, 9, 3850–3855. DOI: [10.1021/acs.jpcclett.8b01384](https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b01384)
- Sonogashira cross-coupling and homo-coupling on a silver surface: chlorobenzene and phenylacetylene on Ag(100).
J. Amer. Chem. Soc. **2015**, 137, 940–947. DOI: [10.1021/ja5115584](https://doi.org/10.1021/ja5115584)

- Highly active copper-ceria and copper-ceria-titania catalysts for methanol synthesis from CO₂
Science **2014**, 345, 546-550. DOI: [10.1126/science.1253057](https://doi.org/10.1126/science.1253057)
- CO oxidation on inverse CeO_x/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceriapromoted dissociation of O₂
J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 3444-3451. DOI: [10.1021/ja1087979](https://doi.org/10.1021/ja1087979)

Proyectos en los que el profesor JF Sanz fue IP (últimos 10 años):

- High throughput computing for accelerated photovoltaic material discovery: from material database to the new generation of photovoltaic materials (HT PHOTO DB)
Entidad financiadora EU, Proyecto: H2020-752608
Desde 01-04-2018 hasta 31-03-2020
Cantidad: 158.121 €. <https://cordis.europa.eu/project/rcn/209059>
- Computational design of advanced catalysts: metal nanoparticles deposited on mixed metal-oxides (COMPDESCAT).
Financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad MINECO, Proyecto: CTQ2015-64669-P
Desde 1/01/2016 hasta 31/12/2019.
Cantidad: 61.589 € + beca estudiante.
https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=26930
- Sensitized solar cells: Electronic structure of metal sulphide NPs used in Quantum Dots Sensitized Solar Cells (QDSC)
Financiado por la Junta de Andalucía, Proyecto: P12-FQM-1595
Desde 3-01-2014 hasta 13-01-2018
Cantidad: 150.644 €.
https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=21828
- Computational modeling of catalysts: Supported Metal and metal-oxide nanoparticles: Structure, electronic properties and catalytic activity.
Financiado por el Ministerio de Economía y Competitividad MINECO, Proyecto: MAT2012-31526.
Desde 1/01/2013 hasta 31/12/2015.
Cantidad: 55.000 + beca estudiante .
https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=21573
- Sensitized solar cells: Computational simulations of the electrolyte/semiconductor interphase
Financiado por la Junta de Andalucía, Proyecto: P08-FQM-03661.
Desde 3-01-2009 hasta 13-01-2013 Cantidad: 151.323 € .
https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=14660

- Computational modeling of catalysts: Reactivity of TiO_2 and SnO_2 surfaces doped with C, N y Sb.

Financiado por Ministerio MICINN, MAT2008-04918

Desde 1/01/2009 Hasta 31/12/2011.

Cantidad 136.000 € + beca estudiante.

https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=14351

- Funcionalización superficial de materiales para aplicaciones de alto valor añadido (FUNCOAT)

Financiado por MICINN, Consolider-Ingenio, Proyecto: CSD2008 – 00023.

Desde 25/12/2008 hasta 15/12/2014.

Cantidad: 199.672 €.

https://investigacion.us.es/sisius/sis_proyecto.php?idproy=16276