

<b>Parte A. DATOS PERSONALES</b>		<b>Fecha del CVA</b>	2023
Nombre y apellidos	JESUS GRACIANI ALONSO		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	B-1136-2009	
	Código Orcid	0000-0003-4791-0127	

### A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Química Física		
Dirección	Sevilla, Andalucía, España		
Teléfono	Correo electrónico	graciani@us.es	
Categoría profesional	Profesor titular de universidad	Fecha inicio	2016
Espec. cód. UNESCO	2210.23, 2211.28, 2307.00, 3208.05		
Palabras clave	Catálisis heterogénea, Materiales nanoestructurados, Modelado y simulación, Nuevos materiales		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Química	Universidad de Sevilla	2002
Doctor en Química	Universidad de Sevilla	2007

### A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)

- Sexenios de investigación: 3. Fecha de entrada en vigor del último concedido: 01/01/2021.
- Artículos publicados en revistas científicas internacionales: 38
- Publicaciones totales en el primer cuartil: 35
- Total de citas recibidas: 3586 (Web of Science)
- Promedio de citas por artículo: 94.37
- Índice *H*: 26
- Promedio citas/año en los últimos 5 años: 368.8
- Citas recibidas en el último año (2021): 341
- Primer autor en un artículo en *Science*, en agosto de 2014
- Artículos publicados en revistas de muy alto impacto:
  - ✓ 1 en *Science* (2014)
  - ✓ 1 en *Proceedings of the National Academy of Science of the USA* (2009)
  - ✓ 3 en *Angewandte Chemie International Edition* (2009, 2011, 2013)
  - ✓ 4 en *Journal of the American Chemical Society* (2008, 2010, 2011, 2015)
  - ✓ 2 en *Journal of Physical Chemistry Letters* (2016)
  - ✓ 3 en *ACS Catalysis* (2016, 2019)
- Los trabajos del candidato han sido **elogiados** por los editores de *Science* (ver *Science*, **324**, 441, 2009) y en *Angewandte Chemie* (ver *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 12022, 2014).
- The Journal of Physical Chemistry Letters (American Chemical Society), reconoció en su sección anual sobre los **mejores artículos en Química Física de Materiales para Energía** nuestro artículo: *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 2627 (2016). Fue además **portada** de dicha publicación en el mes de julio de 2016.
- Premio Universidad de Sevilla a Trabajos de Investigación de **Especial Relevancia** (2015)

### Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Trayectoria académica, cargos y ocupaciones (orden cronológico):

- **Licenciado** en Química (Universidad de Sevilla, 2002).
- **Becario FPI** (Grupo de Química Teórica, Dpto. Química Física, Univ. de Sevilla, 2003-2007).
- **Estancias** de investigación (Chemistry Department, **Brookhaven National Laboratory**, BNL, Upton, New York, USA, 2005 y 2006, bajo la supervisión del Dr. Jose A. Rodriguez).
- **Doctor** en Química por la Universidad de Sevilla (Química Teórica y Computacional, Dpto. Química Física, dirigida por el catedrático Dr. Javier Fernández Sanz) (noviembre 2007).
- Contratado como **Research Associate** por el *Departamento de Energía de los EEUU* (Grupo de investigación: “*Catalysis: Reactivity and Structure*”, Chemistry Department, BNL, Upton, New York, EEUU. 2008-2009).
- Profesor **Ayudante** (Dpto. Química Física, Univ. de Sevilla, 2009-2010).
- Profesor **Ayudante Doctor** (Dpto. Química Física, Univ. de Sevilla, 2010-2012).
- Profesor **Contratado Doctor** (Dpto. Química Física, Univ. de Sevilla, 2012 hasta 2016).
- Profesor **Titular de Universidad** (Dpto. Química Física, Univ. de Sevilla, 2016 hasta la fecha ).
- **Estancias anuales** de investigación en el **Brookhaven National Laboratory** con el Dr. José A. Rodríguez desde 2012 hasta la actualidad.

#### **Premios (orden cronológico):**

- **Premio Extraordinario de Doctorado** de la Universidad de Sevilla (convocatoria 2007-2008, Resolución rectoral de 15 de Febrero de 2010).
- **Premio Joven Investigador Real Maestranza de Caballería de Sevilla**, 2013.
- **Premio Universidad de Sevilla a Trabajos de Investigación de Especial Relevancia** (2015)

#### **Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)**

##### **C.1. Publicaciones** (se incluyen sólo las 10 más representativas de los últimos años)

1. *Adsorption and activation of CO<sub>2</sub> on Pt/CeOx/TiO<sub>2</sub>(110): Role of the Pt-CeOx interface.* D.C. Grinter, J. Graciani, R.M. Palomino, F. Xu, I. Waluyo, J. F. Sanz, S. D. Senanayake, J. A. Rodríguez.  
*Surface Science*, **710**, 121852 (2021)
2. *Water Gas Shift Reaction on K/Cu(111) and Cu/K/TiO<sub>2</sub>(110) Surfaces: Alkali Promotion of Water Dissociation and Production of H<sub>2</sub>.* J. A. Rodríguez, E. R. Remesal, P. J. Ramírez, I. Orozco, Z. Y. Liu, J. Graciani, S. D. Senanayake, J. F. Sanz.  
*ACS Catalysis*, **9**, 10751 (2019)
3. *Inverse Oxide/Metal Catalysts in Fundamental Studies and Practical Applications: A Perspective of Recent Developments.* J. A. Rodríguez, P. Liu, J. Graciani, S. D. Senanayake, D. C. Grinter, D. J. Stacchiola, J. Hrbek, J. F. Sanz.  
*J. Phys. Chem. Letters* (**perspective**), **7**, 2627 (2016)
4. *Low Pressure CO<sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol over Gold Nanoparticles Activated on a CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> Interface.* X. Yang, S. Kattel, S. D. Senanayake, J. A. Boscoboinik, X. Nie, J. Graciani, J. A. Rodríguez, P. Liu, D. J. Stacchiola, J. G. Chen.  
*Journal of the American Chemical Society*, **137**, 10104 (2015)
5. *Highly active copper-ceria and copper-ceria-titania catalysts for methanol synthesis from CO<sub>2</sub>.* J. Graciani, K. Mudiyansele, F. Xu, A. E. Baber, J. Evans, S. D. Senanayake, D. J. Stacchiola, P. Liu, J. Hrbek, J. F. Sanz, J. A. Rodríguez.  
*Science*, **345**, 546 (2014)

6. *Importance of the Metal-Oxide Interface in Catalysis: In Situ Studies of the Water-Gas Shift Reaction by Ambient-Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy.* K. Mudiyansele, S. D. Senanayake, L. Faria, S. Kundu, A. E. Baber, J. Graciani, A. B. Vidal, S. Agnoli, J. Evans, R. Chang, S. Axnanda, Z. Liu, J. F. Sanz, P. Liu, J. A. Rodriguez, D. J. Stacchiola.  
*Angew. Chem. Int. Ed.*, **52**, 5101 (2013)
7. *CO Oxidation on Inverse CeO<sub>x</sub>/Cu(111) Catalysts: High Catalytic Activity and Ceria-Promoted Dissociation of O<sub>2</sub>.* F. Yang, Jesús Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. F. Sanz, J. A. Rodriguez.  
*J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 3444 (2011)
8. *Gold, Copper, and Platinum Nanoparticles Dispersed on CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub>(110) Surfaces: High Water-Gas Shift Activity and the Nature of the Mixed-Metal Oxide at the Nanometer Level.* J. B. Park, J. Graciani, J. Evans, D. J. Stacchiola, S. D. Senanayake, L. Barrio, P. Liu, J. F. Sanz, J. Hrbek, J. A. Rodríguez.  
*J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 356 (2010)
9. *Water-Gas Shift Reaction on a Highly Active Inverse CeO<sub>x</sub>/Cu(111) Catalyst: Unique Role of Ceria Nanoparticles.* J. A. Rodríguez, Jesús Graciani, J. Evans, J. B. Park, F. Yang, D. J. Stacchiola, S. D. Senanayake, S. Ma, M. Pérez, P. Liu, J. F. Sanz, J. Hrbek.  
*Angew. Chem. Int. Ed.*, **48**, 8047 (2009)
10. *High catalytic activity of Au/CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub>(110) controlled by the nature of the mixed-metal oxide at the nanometer level.* J. B. Park, J. Graciani, J. Evans, D. J. Stacchiola, S. Ma, P. Liu, A. Nambu, J. F. Sanz, J. Hrbek, J. A. Rodriguez.  
*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **106**, 4975 (2009)

## C.2. Proyectos

1. CTQ2015-64669-P. *Diseño Computacional de Catalizadores Avanzados: Nanopartículas Metálicas Soportadas Sobre Óxidos Metálicos Mixtos.* **Ministerio De Economía Y Competitividad.** Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2016-2019. 61589 EUR. Investigador/a.
2. P12-FQM-1595. *Celdas Solares con Sensibilizador: Propiedades Electrónicas de Nanoestructuras de Sulfuros Metálicos Utilizados Como Captadores de Energía (Qdsc).* CONSEJERÍA DE ECONOMÍA, INNOVACIÓN Y CIENCIA. **Junta de Andalucía.** Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2014-2019. 150644 EUR. Investigador/a.
3. MAT2012-31526. *Simulación de Catalizadores: Nanopartículas de Metales y Óxidos Metálicos Depositadas en un Soporte: Estructura, Propiedades Electrónicas y Actividad Catalítica.* **Ministerio De Economía Y Competitividad.** Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2013-2015. 64350 EUR. Investigador/a.
4. 1735/0638. *Aplicación de la Química Computacional a procesos catalíticos de epoxidación.* **Repsol S.A.**. 2012-2013. 38.500 EUR. Investigador/a.
5. MAT2008-04918. *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.* **Ministerio De Economía Y Competitividad.** Fernández-Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2009-2011. 164560 EUR. Investigador/a.
6. CSD2008-00023. *Funcionalización superficial de materiales para aplicaciones de alto valor añadido (FUNCOAT).* **CONSOLIDER-INGENIO. Ministerio de Ciencia e Innovación.** Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2008-2013. 199672 EUR. Investigador/a.

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

1. *Estudio computacional de la interacción entre un material silíceo y dos fluidos inmiscibles*. Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2014-2015. 134552 EUR. Investigador/a.
2. *Aplicación de Química computacional a Procesos catalíticos de Epoxidación*. Fdez. Sanz, Javier (Universidad de Sevilla). 2012-2013. 46585 EUR. Investigador/a.

### C.4. Congresos (sólo se incluyen algunos más relevantes)

1. **14 th International Congress on Chemical and Process Engineering**. 26<sup>th</sup>-29<sup>th</sup> May **2019** (Bologna, **ITALY**). Talk entitled: “*CO<sub>2</sub> activation on Cu/TiO<sub>2</sub> surfaces promoted by potassium*”.
2. **International Conference on Applied Catalysis and Chemical Engineering**. 8<sup>th</sup>-10<sup>th</sup> April **2019** (Dubai, **E.A.U**). Talk entitled: “*CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> Nanostructured Interfaces as Highly Active Catalysts*”.
3. **253rd National Meeting of the American-Chemical-Society (ACS)**. Theme: Advanced Materials, Technologies, Systems, and Processes. 2<sup>nd</sup>-6<sup>th</sup> April **2017** (San Francisco, CA, **USA**). Talk entitled: “*Inverse oxide/metal systems and fundamental studies in heterogeneous catalysis*”.
4. **16<sup>th</sup> International Congress on Catalysis**. Theme: Catalysis for the Sustainable Development of the World. Session: Catalysis for energy. 3<sup>rd</sup>-8<sup>th</sup> July **2016** (Beijing, **CHINA**). Talk entitled: “*Hydrogenation of CO<sub>2</sub> to methanol: importance of metal-oxide and metal-carbide interfaces*”.
5. **251st National Meeting of the American-Chemical-Society (ACS)**. Workshop: **CO<sub>2</sub> Conversion & Utilization Conversion**. 13<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> de March **2016** (San Diego, **USA**). Talk entitled: “*Controlling the nature of mixed-metal oxide catalysts at the nanometer level: CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> and the importance of Ce<sup>3+</sup> as an active site*”.
6. **251st National Meeting of the American-Chemical-Society (ACS)**. Workshop: **Elucidation of Mechanisms & Kinetics on Surfaces**. 13<sup>th</sup>-17<sup>th</sup> de March **2016** (San Diego, **USA**). Talk entitled: “*In situ studies and the mechanism of the water-gas shift reaction on Cu-ceria catalysts*”.
7. **250<sup>th</sup> American Chemical Society National Meeting & Exposition**. Workshop: **Advances in Ceria Based Catalysis: Structural, Electronic & Chemical Properties Tailored for Chemical Conversion**. 16<sup>th</sup>-18<sup>th</sup> August **2015** (Boston, **USA**). Talk entitled: “*Understanding Ceria-based Nanostructured Catalysts: Water-gas Shift and Methanol Synthesis Reaction Example*”.
8. **CeO<sub>2</sub>-based Materials in Catalysis and Electrochemistry**. 27<sup>th</sup>-30<sup>th</sup> July **2015** (Schloss Rauischholzhausen, **GERMANY**). Talk entitled: “*Understanding Ceria-based nanostructured catalysts: Water Gas Shift and Methanol Synthesis reactions example*”.
9. **9<sup>th</sup> Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)**. 17<sup>th</sup>-22<sup>nd</sup> July **2011** (Santiago de Compostela, **SPAIN**). Talk entitled: “*Mechanism of the Water-Gas Shift Reaction: Insights from First Principles Calculations*”.
10. **Fifth San Luis Symposium on Surfaces, Interfaces and Catalysis**. 9<sup>th</sup>-19<sup>th</sup> April **2010** (Sao Pedro, **BRAZIL**). Talk entitled: “*High catalytic activity of CeO<sub>x</sub>/Au(111) and Au/CeO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub>(110) for the wáter-gas shift reaction: Special properties of CeO<sub>x</sub> Nanoparticles*”.