



## **Alberto Castro Barrigón**

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 19/08/2024

**v 1.4.3**

59314a816431b63a44c20085d6f8dd55

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>

## Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Mi trayectoria científica se ha centrado en el desarrollo de métodos teóricos y computacionales para el problema de la estructura electrónica, principalmente basados en la teoría de funcionales de la densidad (DFT) y métodos relacionados. También he trabajado en la teoría de control óptimo (aplicada por ejemplo a la fotoquímica o a la manipulación de dispositivos de información cuántica), y en teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos.

Este trabajo ha producido 81 publicaciones, citadas en numerosas ocasiones (4544 citas; índice H=28):

<https://www.webofscience.com/wos/author/record/C-2557-2008>

Durante la realización de mi tesis doctoral, en la Universidad de Valladolid, dirigido por los Profs. Julio Alfonso Alonso y Angel Rubio (actualmente director del Instituto Max-Planck de Estructura y Dinámica de la Materia, en Hamburgo), fui uno de los desarrolladores fundacionales del código “octopus” ([www.octopus-code.org](http://www.octopus-code.org)). Este código implementa la versión dependiente del tiempo la DFT (TDDFT) y métodos relacionados. Ha sido utilizado para describir propiedades ópticas, magnéticas, estructurales y dinámicas de todo tipo de sistemas. El éxito del proyecto lo demuestran las más de 1800 citas que han recibido los cuatro artículos que describen el código.

Tras defender la tesis, trabajé en la Universidad Libre de Berlín en el grupo del Prof. Gross, pionero de la TDDFT. El trabajo se centró en la interacción de la materia con láseres ultra-intensos. Asimismo, fuimos los primeros en utilizar la teoría de control óptimo cuántico (QOCT) para sistemas electrónicos. En particular, desarrollamos la combinación de la TDDFT con la QOCT.

En 2009 me trasladé, como investigador de la fundación ARAID, al Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. En este instituto he dirigido cinco proyectos de investigación como investigador principal: el proyecto europeo “CRONOS”, del VII Programa Marco, y cuatro proyectos del Ministerio (uno de ellos en curso). He sido investigador de ARAID hasta julio de 2024.

Desde 2015 a 2017, he dirigido el Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling (ZCAM). El ZCAM es uno de los nodos del CECAM ([www.cecarn.org](http://www.cecarn.org)), y está dedicado a la organización de talleres y tutoriales acerca de métodos teóricos y computacionales en Física y Química atómica y molecular y en temas fronterizos. Como director del ZCAM, he llevado a cabo una actividad intensa de organización de talleres y cursos.



Desde el 3 de julio de 2024, soy profesor titular del Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica de la Universidad de Valladolid.

Mis líneas de investigación principales se han centrado en:

1. Mejoras computacionales y algorítmicas en teoría de estructura electrónica.
2. Avances teóricos en la QOCT aplicada a problemas de estructura electrónica, en particular su fusión con la TDDFT y con la dinámica molecular.
3. Estudio del efecto del control detallado del campo eléctrico de un láser sobre átomos y moléculas: generación de altos armónicos, foto-disociación, etc.
4. Estudios ab initio de procesos dinámicos en “quantum dots” formados en gases electrónicos bi-dimensionales.
5. Cálculo de respuesta óptica de cromóforos biológicos, y clusters, con las diversas formulaciones de respuesta lineal de la TDDFT.
6. Aplicación de la QOCT a nanoimanes moleculares.

Finalmente, aunque he trabajado en plazas y centros de investigación no docentes, he colaborado con departamentos universitarios, impartiendo cursos de grado en la Universidad Libre de Berlín y de máster en la Universidad de Zaragoza, con la que he colaborado como profesor asociado. He dirigido tres tesis y varios trabajos de fin de grado y máster. He realizado una amplia labor docente en escuelas especializadas internacionales.

Otros méritos:

Acreditación ANECA como profesor titular.

Acreditación I3.

Premio especial del jurado en el XIX Certamen Universitario “Arquímedes” (2022), por la tutoría del trabajo titulado “Corrección cuántica de errores con qudits moleculares de espín”, realizado por el estudiante Alonso Hernández Antón.

	<p><b>Méritos de Liderazgo</b></p>
	<p>Breve exposición de los méritos relativos a actividades de liderazgo de especial relevancia.</p>



## Indicadores generales de calidad de la producción científica

Información sobre el número de sexenios de investigación y la fecha del último concedido, número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años, citas totales, promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual), publicaciones totales en primer cuartil (Q1), índice h. Incluye otros indicadores considerados de importancia.

ORCID: 0000-0002-9253-7926

<https://orcid.org/0000-0002-9253-7926>

Perfil de Web of Science en:

<https://www.webofscience.com/wos/author/record/C-2557-2008>

Tesis doctorales dirigidas: 3

Proyectos europeos liderados como IP: 1

Proyectos nacionales liderados como IP: 4

Sexenios de investigación concedidos 3 (2000-2005; 2006-2011, 2012-2017).

Sexenios solicitados pendientes de aprobar: 1 (2018-2023)

Datos de publicaciones: WoS H-index (05/2024): 28

Número de citas promedio por artículo: 62

Número de citas totales: 4464



## Alberto Castro Barrigón

Apellidos: **Castro Barrigón**  
 Nombre: **Alberto**  
 ORCID: **0000-0002-9253-7926**  
 ResearcherID: **C-2557-2008**  
 Fecha de nacimiento: **24/08/1976**  
 Sexo: **Hombre**  
 Nacionalidad: **España**  
 C. Autón./Reg. de contacto: **Aragón**  
 Página web personal: **<https://personal.unizar.es/acastro>**

### Situación profesional actual

**Entidad empleadora:** UNIVERSIDAD DE VALLADOLID      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Categoría profesional:** Profesor Titular  
**Fecha de inicio:** 03/07/2024  
**Modalidad de contrato:** Funcionario/a      **Régimen de dedicación:** Tiempo completo

### Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	FUNDACION AGENCIA ARAGONESA PARA LA INVESTIGACION Y EL DESARROLLO (ARAGON I+D)	Investigador "ARAID"	01/10/2009
2	Universidad de Zaragoza	Profesor Asociado	2021
3	Instituto "Fritz-Haber" de la Sociedad Max-Planck, Berlin	Investigador post-doctoral	01/06/2009
4	Universidad Libre de Berlín	Investigador post-doctoral	01/08/2004
5	Universidad de Valladolid	Becario FPU	01/01/2000
6	Universidad de Valladolid	Becario de colaboración en departamentos universitarios	01/10/1998

**1 Entidad empleadora:** FUNDACION AGENCIA ARAGONESA PARA LA INVESTIGACION Y EL DESARROLLO (ARAGON I+D)

**Categoría profesional:** Investigador "ARAID"

**Fecha de inicio-fin:** 01/10/2009 - 30/06/2024      **Duración:** 15 años

**2 Entidad empleadora:** Universidad de Zaragoza

**Departamento:** Facultad de Ciencias

**Categoría profesional:** Profesor Asociado

**Fecha de inicio:** 2021

**Duración:** 2 años

**Modalidad de contrato:** Contrato laboral temporal



**Régimen de dedicación:** Tiempo parcial

**Ámbito actividad de dirección y/o gestión:** Universitaria

- 3 Entidad empleadora:** Instituto "Fritz-Haber" de la Sociedad Max-Planck, Berlín **Tipo de entidad:** Centro de I+D  
**Ciudad entidad empleadora:** Berlín, Alemania  
**Categoría profesional:** Investigador post-doctoral **Dirección y gestión (Sí/No):** No  
**Fecha de inicio:** 01/06/2009 **Duración:** 4 meses  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral temporal  
**Régimen de dedicación:** Tiempo completo
- 4 Entidad empleadora:** Universidad Libre de Berlín **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad empleadora:** Berlín, Alemania  
**Categoría profesional:** Investigador post-doctoral **Dirección y gestión (Sí/No):** No  
**Fecha de inicio:** 01/08/2004 **Duración:** 4 años - 9 meses  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral temporal  
**Régimen de dedicación:** Tiempo completo
- 5 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Departamento:** Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias  
**Ciudad entidad empleadora:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Categoría profesional:** Becario FPU **Dirección y gestión (Sí/No):** No  
**Fecha de inicio:** 01/01/2000 **Duración:** 4 años - 8 meses  
**Modalidad de contrato:** Becario/a (pre o posdoctoral, otros)  
**Régimen de dedicación:** Tiempo completo
- 6 Entidad empleadora:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Departamento:** Departamento de Física, Atómica, Molecular y Nuclear, Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid  
**Ciudad entidad empleadora:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Categoría profesional:** Becario de colaboración en departamentos universitarios **Dirección y gestión (Sí/No):** No  
**Fecha de inicio:** 01/10/1998 **Duración:** 1 año  
**Modalidad de contrato:** Becario/a (pre o posdoctoral, otros)  
**Régimen de dedicación:** Tiempo parcial



## Formación académica recibida

### Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

**Titulación universitaria:** Titulado Superior

**Nombre del título:** Licenciado en Física Especialidad Física Fundamental

**Entidad de titulación:** Universidad de Valladolid      **Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 1999

### Doctorados

**Programa de doctorado:** Física

**Entidad de titulación:** Universidad de Valladolid      **Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 2004

### Formación especializada, continuada, técnica, profesionalizada, de reciclaje y actualización (distinta a la formación académica reglada y a la sanitaria)

**Título de la formación:** Inglés

**Entidad de titulación:** Escuela Oficial de Idiomas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal

**Fecha de finalización:** 10/09/1993

### Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Francés		A1	A1	A1	B1
Inglés		C1	C1	C1	C1

## Actividad docente





## Formación académica impartida

- 1** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Algebra II  
**Tipo de programa:** Licenciatura  
**Titulación universitaria:** Grado en Física  
**Fecha de inicio:** 2022  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 12  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Fecha de finalización:** 2023  
**Tipo de entidad:** Universidad
- 2** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a los Métodos Computacionales en Biología  
**Tipo de programa:** Máster oficial  
**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa  
**Fecha de inicio:** 2022  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 16,7  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Fecha de finalización:** 2023  
**Tipo de entidad:** Universidad
- 3** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a los Métodos Físicos y Matemáticos en Biología  
**Tipo de programa:** Máster oficial  
**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa  
**Fecha de inicio:** 2022  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 27  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Fecha de finalización:** 2023  
**Tipo de entidad:** Universidad
- 4** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Simulación de Biomoléculas  
**Tipo de programa:** Máster oficial  
**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa  
**Fecha de inicio:** 2022  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 19,8  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Fecha de finalización:** 2023  
**Tipo de entidad:** Universidad
- 5** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Algebra II  
**Tipo de programa:** Licenciatura  
**Titulación universitaria:** Grado en Física  
**Fecha de inicio:** 2021  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 18

**Fecha de finalización:** 2022



**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**Tipo de entidad:** Universidad

**6 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a los Métodos Computacionales en Biología

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Tipo de docencia:** Teórica presencial

**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa

**Fecha de inicio:** 2021

**Fecha de finalización:** 2022

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas

**Nº de horas/créditos ECTS:** 27,2

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza

**Tipo de entidad:** Universidad

**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**7 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a los Métodos Físicos y Matemáticos en Biología

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Tipo de docencia:** Teórica presencial

**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa

**Fecha de inicio:** 2021

**Fecha de finalización:** 2022

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas

**Nº de horas/créditos ECTS:** 33

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza

**Tipo de entidad:** Universidad

**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**8 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Simulación de Biomoléculas

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Tipo de docencia:** Teórica presencial

**Titulación universitaria:** Master en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa

**Fecha de inicio:** 2021

**Fecha de finalización:** 2022

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas

**Nº de horas/créditos ECTS:** 29,8

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza

**Tipo de entidad:** Universidad

**Facultad, instituto, centro:** Ciencias

**9 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Simulation of Biomolecules

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Tipo de docencia:** Teórica presencial

**Tipo de asignatura:** Troncal

**Titulación universitaria:** Máster en "Quantitative Biotechnology"

**Frecuencia de la actividad:** 3

**Fecha de inicio:** 2018

**Fecha de finalización:** 2020

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos

**Nº de horas/créditos ECTS:** 2

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza

**Tipo de entidad:** Universidad

**Idioma de la asignatura:** Inglés

**10 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Teoría Cuántica de la Materia

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Tipo de docencia:** Teórica presencial

**Tipo de asignatura:** Obligatoria

**Titulación universitaria:** Máster en Física y Tecnologías Físicas

**Frecuencia de la actividad:** 6

**Fecha de inicio:** 2011**Fecha de finalización:** 2018**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 1**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Física Teórica**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España**11 Tipo de docencia:** Docencia internacional**Nombre de la asignatura/curso:** Density Functional Theory**Tipo de programa:** Licenciatura**Tipo de docencia:** Práctica (Aula-Problemas)**Titulación universitaria:** Física**Fecha de finalización:** 2008**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad realización:** Berlín, Alemania**12 Tipo de docencia:** Docencia internacional**Nombre de la asignatura/curso:** Computerphysik (Numerische Methoden)**Tipo de programa:** Licenciatura**Tipo de docencia:** Práctica (Aula-Problemas)**Titulación universitaria:** Física**Fecha de finalización:** 2007**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad realización:** Berlín, Alemania**13 Tipo de docencia:** Docencia internacional**Nombre de la asignatura/curso:** Computerphysik (Numerische Methoden)**Tipo de programa:** Licenciatura**Tipo de docencia:** Práctica (Aula-Problemas)**Titulación universitaria:** Física**Fecha de finalización:** 2006**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad realización:** Berlín, Alemania

## Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

**1 Título del trabajo:** Hybrid quantum-classical systems: Statistical mechanics, thermodynamics and field theory**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza**Tipo de entidad:** Universidad**Alumno/a:** Carlos Boucherlier Madre**Calificación obtenida:** CUM LAUDE**Fecha de defensa:** 18/01/2024**Doctorado Europeo:** Sí**Mención de calidad:** Sí**2 Título del trabajo:** Quantum error correction with molecular spin qubits**Tipo de proyecto:** Trabajo fin de grado**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza**Tipo de entidad:** Universidad**Alumno/a:** Alonso Hernández Antón**Fecha de defensa:** 2021



- 3** **Título del trabajo:** Implementación de la teoría de funcionales de la densidad sobre código QUTIP  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Fernando Plou Llorente  
**Fecha de defensa:** 2021
- 4** **Título del trabajo:** Optimal control for the design of quantum computation circuits: Implementation of Krotov's algorithm  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Martín Gros Breto  
**Fecha de defensa:** 2021
- 5** **Título del trabajo:** Quantum error correction with molecular spin qubits  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Alonso Hernández Antón  
**Fecha de defensa:** 2021
- 6** **Título del trabajo:** Computational and Theoretical Developements for (Time Dependent) Density Functional Theory. Exchange and correlation functionals, numerical propagators, and combination with optimal control theory  
**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Adrián Gómez Pueyo  
**Fecha de defensa:** 07/2020
- 7** **Título del trabajo:** Construcción computacional de puertas lógicas cuánticas mediante la teoría de control óptimo  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Adrián García Carrizo  
**Fecha de defensa:** 06/2020
- 8** **Título del trabajo:** Construcción de puertas lógicas para el desarrollo de la computación cuántica mediante la teoría de control óptimo  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Adrián García Carrizo  
**Fecha de defensa:** 06/2019
- 9** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control in Biophysics: studying optimization methods  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Master  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Aitor Sánchez Mansilla  
**Fecha de defensa:** 06/2018
- 10** **Título del trabajo:** Analysis and Control of Transient Spectra Using Time-Dependent Density Functional Theory  
**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral  
**Codirector/a tesis:** Angel Rubio Secades  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** San Sebastián, País Vasco, España  
**Alumno/a:** Jessica Walkenhorst



**Fecha de defensa:** 29/01/2016

**Doctorado Europeo:** Sí

- 11 Título del trabajo:** Un Método para el Cálculo de la Mejor Función de Interacción Electrón-Electrón para un Funcional de Intercambio y Correlación Dado  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza  
**Alumno/a:** Adrián Gómez Pueyo  
**Fecha de defensa:** 07/07/2015
- 12 Título del trabajo:** Modelización computacional de nanoestructuras: introducción a la espectroscopia teórica  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Andrés María Belaza  
**Fecha de defensa:** 03/07/2014
- 13 Título del trabajo:** Estructura electrónica en átomos, moléculas y nanoestructuras: Métodos de simulación computacional  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Adrián Gómez Pueyo  
**Fecha de defensa:** 25/06/2014
- 14 Título del trabajo:** Quantum Optimal Control of High Harmonic Generation from Molecular Systems  
**Tipo de proyecto:** Tesina  
**Codirector/a tesis:** Angel Rubio Secades  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Ali Abedi  
**Fecha de defensa:** 2008

### Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- 1 Descripción de la actividad:** Clases en la "School on Ultrafast phenomena in Chemistry: Laser- matter interactions at the femto- and atto- second time scales". Pertenciente al "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modeling". 8 horas.  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** CECAM-ES      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Fecha de finalización:** 24/05/2024
- 2 Descripción de la actividad:** Clases en la "School on Ultrafast phenomena in Chemistry: Laser- matter interactions at the femto- and atto- second time scales". Pertenciente al "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modeling". 8 horas.  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** CECAM-ES      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Fecha de finalización:** 24/05/2023
- 3 Descripción de la actividad:** Clases en la "School on New Computational Methods for Attosecond Molecular Processes"  
**Entidad organizadora:** Escuela organizada por ATTOCHEM, CECAM-ES, y la acción COST CA18222      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Fecha de finalización:** 01/04/2022



- 4 Descripción de la actividad:** Clases en el Curso de Verano "Spectroscopic and computational methods towards molecular structure and reactivity", organizado por la Universidad de Zaragoza  
**Entidad organizadora:** Universidad de Zaragoza  
**Fecha de finalización:** 24/07/2021
- 5 Descripción de la actividad:** Clases en la "School on New Computational Methods for Attosecond Molecular Processes". Escuela organizada por ATTOCHEM, CECAM-ES, y la acción COST CA18222.  
**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid  
**Fecha de finalización:** 22/03/2021
- 6 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (4h) en el curso "Molecular spectroscopy and excited states" perteneciente al "Erasmus Mundus Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 08/05/2020
- 7 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (4h) el "School on New Computational Methods for Attosecond Molecular Processes", perteneciente al "Erasmus Mundus Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 29/05/2019
- 8 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (6h) en la "School on Quantum and mixed quantum classical dynamics in photochemistry", perteneciente al "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modeling"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 22/03/2019
- 9 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (4h) en la el curso "School on New Computational Methods for Attosecond Molecular Processes", perteneciente al "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modeling"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 21/05/2018
- 10 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (9h) en la "8th International Workshop and School on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications"  
**Ciudad de realización:** Benasque, España  
**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE  
**Fecha de finalización:** 27/01/2018
- 11 Descripción de la actividad:** Clases impartidas en el tutorial "Theoretical Methods in Quantum Chemistry", perteneciente al "European Joint Doctorate and ITN coded ITN-EJD:TCCM.642294: Theoretical Chemistry and Computational Modeling"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España

**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación



**Entidad organizadora:** Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling (ZCAM)

**Fecha de finalización:** 06/10/2017

**12 Descripción de la actividad:** Clases impartidas en la "Telluride School on Time-Dependent Density-Functional Theory"

**Entidad organizadora:** Telluride Science Research Center

**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación

**Fecha de finalización:** 14/07/2017

**13 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (10h) en la "7th Workshop and School on Time-dependent density functional theory: Prospects and applications"

**Ciudad de realización:** Benasque, España

**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE

**Fecha de finalización:** 19/09/2016

**14 Descripción de la actividad:** Clases impartidas en la Escuela "Static and Dynamic methods for the study of photoinitiated processes", perteneciente al "European Master on Theoretical Chemistry and Computational Modeling"

**Ciudad de realización:** Zaragoza, España

**Entidad organizadora:** Universidad Autónoma de Madrid

**Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de finalización:** 18/04/2016

**15 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (6h) en la "School on New Computational Methods for Attosecond Molecular Processes"

**Ciudad de realización:** Zaragoza, España

**Entidad organizadora:** Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling (ZCAM)

**Fecha de finalización:** 20/03/2015

**16 Descripción de la actividad:** CECAM Tutorial: Basic techniques and tools for development and maintenance of atomic-scale software

**Ciudad de realización:** Lausanne, Suiza

**Entidad organizadora:** Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM)

**Fecha de finalización:** 17/10/2014

**17 Descripción de la actividad:** CMMP Autumn School: Basics of Electronic Structure Calculations

**Ciudad de realización:** Tampere, Finlandia

**Entidad organizadora:** Tampere University of Technology

**Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de finalización:** 14/09/2014

**18 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (20 horas) en la "6th Workshop and School on Time- dependent density functional theory: Prospects and applications"

**Ciudad de realización:** Benasque, España

**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE

**Fecha de finalización:** 13/01/2014

**19 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (24h) en la "5th Workshop and School on Time- dependent density functional theory: Prospects and applications"

**Ciudad de realización:** Benasque, España

**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE



**Fecha de finalización:** 12/01/2012

- 20 Descripción de la actividad:** Curso "Electronic Structure with the Elk Code"  
**Ciudad de realización:** Lausanne, Suiza  
**Entidad organizadora:** Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire  
**Tipo de entidad:** Fundación  
**Fecha de finalización:** 23/07/2011
- 21 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (3h) en la "Pan American Advanced Studies Institute School on Electronic Properties of Complex Systems"  
**Ciudad de realización:** Cartagena, Colombia  
**Entidad organizadora:** Pan American Advanced Studies Institute  
**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación  
**Fecha de finalización:** 17/06/2011
- 22 Descripción de la actividad:** Clases impartidas en el Tutorial "Basic techniques and tools for the development of atomic-scale software"  
**Ciudad de realización:** Lausanne, Suiza  
**Entidad organizadora:** Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM)  
**Tipo de entidad:** Fundación  
**Fecha de finalización:** 21/06/2010
- 23 Descripción de la actividad:** Clases impartidas (18h) en la "4th Workshop and School on Time-Dependent Density-Functional Theory"  
**Ciudad de realización:** Benasque, España  
**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE  
**Fecha de finalización:** 17/01/2010
- 24 Descripción de la actividad:** Clases impartidas en el tutorial "Basic techniques and tools for the development of atomic-scale software"  
**Ciudad de realización:** Zaragoza, España  
**Entidad organizadora:** Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM)  
**Tipo de entidad:** Fundación  
**Fecha de finalización:** 15/02/2008
- 25 Descripción de la actividad:** Clases (2 teóricas + 20 prácticas) impartidas en la "3rd International Workshop and School on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications"  
**Ciudad de realización:** Benasque, España  
**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE  
**Fecha de finalización:** 2008
- 26 Descripción de la actividad:** Clases (2 teóricas + 20 prácticas) impartidas en la "2nd International Workshop and School on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications"  
**Ciudad de realización:** Huesca, España  
**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE  
**Fecha de finalización:** 27/08/2006
- 27 Descripción de la actividad:** Clases (3 teóricas + 20 prácticas) impartidas en la "International Workshop and School on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications"  
**Ciudad de realización:** Benasque, España  
**Entidad organizadora:** FUNDACION CENTRO DE CIENCIAS DE BENASQUE  
**Fecha de finalización:** 29/08/2004





- 28 Descripción de la actividad:** Lecciones acerca de "Density Functional Theory" en la "1st International Association of Physics Students Summer School - Molecular Dynamics and Electronic Structure"  
**Ciudad de realización:** Coimbra, Portugal  
**Entidad organizadora:** Universidad de Coimbra      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 21/09/2002

## Otros méritos de docencia

Premio especial del jurado en el XIX Certamen Universitario "Arquímedes" (2022), por la tutoría del trabajo titulado "Corrección cuántica de errores con qudits moleculares de espín", realizado por el estudiante Alonso Hernández Antón.

## Experiencia científica y tecnológica

### Actividad científica o tecnológica

#### Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Dinámica y Control de Sistemas Cuánticos e Híbridos clásico-cuánticos (PID2021-123251NB-I00)  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón; Jesús Clemente Gallardo  
**Nº de investigadores/as:** 2  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Ciencia e Innovación      **Tipo de entidad:** Ministerio  
**Fecha de inicio-fin:** 01/09/2022 - 31/08/2026      **Duración:** 4 años  
**Cuantía total:** 48.400 €
- 2 Nombre del proyecto:** Grupo de referencia "Supercomputación y Física de Sistemas Complejos y Biológicos (COMPHYS)", E30-20R  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** David Iñiguez  
**Nº de investigadores/as:** 8  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Diputación General de Aragón      **Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2020 - 31/12/2022
- 3 Nombre del proyecto:** Optimización y modelos microscópicos desde primeros principios (FIS2017-82426-P)  
**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón



**Nº de investigadores/as:** 4

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación. Universidades **Tipo de entidad:** Ministerio

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2018 - 30/09/2022

**Cuantía total:** 42.350 €

**4 Nombre del proyecto:** Scaling-Up Quantum computation with Molecular spins (SUMO)

**Entidad de realización:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Fernando Luis

**Nº de investigadores/as:** 11

**Entidad/es financiadora/s:**

ERA-NET Cofund in Quantum Technologies

**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación

**Fecha de inicio-fin:** 01/04/2018 - 01/04/2021

**Cuantía total:** 140.503 €

**5 Nombre del proyecto:** Grupo de referencia "Supercomputación y Física de Sistemas complejos y biológicos (COMPHYS) E30-17R

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** David Iñiguez

**Nº de investigadores/as:** 8

**Entidad/es financiadora/s:**

Diputación General de Aragón

**Tipo de entidad:** Gobierno Autonómico

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2017 - 31/12/2019

**6 Nombre del proyecto:** Teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos: equilibrio, dinámica, y control  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón

**Nº de investigadores/as:** 4

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación

**Tipo de entidad:** Ministerio

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Cód. según financiadora:** FIS2013-46159-C3-2-P

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2015 - 31/12/2017

**Duración:** 3 años

**Cuantía total:** 38.000 €

**7 Nombre del proyecto:** Una ruta nueva en la búsqueda del funcional exacto de la teoría de funcionales de la densidad

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Grado de contribución:** Coordinador/a científico/a

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón

**Nº de investigadores/as:** 1



**Tipo de participación:** Investigador principal

**Nombre del programa:** Explora Ciencia

**Cód. según financiadora:** FIS2014-61301-EXP

**Fecha de inicio-fin:** 01/09/2015 - 31/08/2017

**Cuantía total:** 35.000 €

**Régimen de dedicación:** Tiempo parcial

**Duración:** 2 años

**Cuantía subproyecto:** 35.000 €

**8 Nombre del proyecto:** Grupo consolidado E24/3 Biocomputación y Física de sistemas complejos (DGA)

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** David Iñiguez

**Entidad/es financiadora/s:**

Diputación General de Aragón

**Tipo de entidad:** Gobierno Autonómico

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2014 - 31/12/2016

**9 Nombre del proyecto:** Time dynamics and Control in nanostructures for magnetic recording and energy applications (CRONOS)

**Entidad de realización:** Instituto Universitario de Investigación de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón

**Entidad/es financiadora/s:**

VII Programa Marco Unión Europea

**Fecha de inicio-fin:** 01/06/2012 - 30/06/2014

**10 Nombre del proyecto:** Simplificar la complejidad: desde las moléculas a los sistemas de muchos agentes

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Castro Barrigón

**Nº de investigadores/as:** 6

**Entidad/es financiadora/s:**

Universidad de Zaragoza

**Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad financiadora:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2013 - 31/12/2013

**11 Nombre del proyecto:** Grupo consolidado 2011.E24/3 Biocomputación y Física de sistemas complejos

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alfonso Tarancón Lafita

**Entidad/es financiadora/s:**

Diputación General de Aragón

**Tipo de entidad:** Gobierno Autonómico

**Ciudad entidad financiadora:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2013

**12 Nombre del proyecto:** Grupo de excelencia E24/3 Biocomputación y Física de sistemas complejos (DGA)

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alfonso Tarancón Lafita

**Entidad/es financiadora/s:**



Centro de Investigación y Tecnología Agroalimentaria **Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación de Aragón

**Ciudad entidad financiadora:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2008 - 31/12/2010

- 13 Nombre del proyecto:** Transistores de efecto de campo preparados con películas de nanotubos de capa única. Aplicación a biosensores para la detección de Beta-amiloide  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Maria Teresa Martínez  
**Tipo de participación:** Otros  
**Nombre del programa:** MICINN  
**Fecha de inicio:** 2011 **Duración:** 3 años
- 14 Nombre del proyecto:** Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Pierpaolo Bruscolini  
**Tipo de participación:** Otros  
**Nombre del programa:** MICINN  
**Cód. según financiadora:** FIS2009-13364-C02-01  
**Fecha de inicio:** 2010 **Duración:** 3 años
- 15 Nombre del proyecto:** Sonderforschungsbereich 658: Elementarprozesse in molekularen Schaltern an Ober?ächen”  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Berlin, Alemania  
**Tipo de participación:** Otros  
**Fecha de inicio:** 2006 **Duración:** 7 años
- 16 Nombre del proyecto:** Nanoscale Quantum Simulations for Nanostructures and Advanced Materials  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Berlín, Alemania



**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Angel Rubio Secades

**Tipo de participación:** Otros

**Nombre del programa:** Network of Excellence, VIth Framework Programme

**Cód. según financiadora:** NMP4-CT- 2004-500198

**Fecha de inicio:** 2004

**Duración:** 4 años

**17 Nombre del proyecto:** Fragmentación y autoensamblado de nanotubos y otras nanoestructuras

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Julio Alfonso Alonso

**Tipo de participación:** Otros

**Cód. según financiadora:** MAT2002-04499-C02-01

**Fecha de inicio:** 2002

**Duración:** 3 años

**18 Nombre del proyecto:** Fragmentación y autoensamblado de pequeños agregados atómicos y nanoestructuras.

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Ámbito geográfico:** Autonómica

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Julio Alfonso Alonso

**Entidad/es financiadora/s:**

Junta de Castilla y León

**Tipo de entidad:** Gobierno Regional

**Ciudad entidad financiadora:** Valladolid, Castilla y León, España

**Tipo de participación:** Otros

**Fecha de inicio:** 2002

**Duración:** 3 años

**19 Nombre del proyecto:** Coupled mechanical and electronic properties of carbon nanotubes based systems (COMELCAM)

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Angel Rubio Secades

**Tipo de participación:** Otros

**Nombre del programa:** Research and Training Network

**Cód. según financiadora:** EC – HPRN-CT-2000-00128

**Fecha de inicio:** 2000

**Duración:** 4 años

**20 Nombre del proyecto:** Nanoscale photon absorption and spectroscopy with electrons (NANOPHASE)

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

**Ámbito geográfico:** Unión Europea



**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Aragón, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Angel Rubio Secades  
**Tipo de participación:** Otros  
**Nombre del programa:** Research and Training Network  
**Cód. según financiadora:** EC – HPRN-CT-2000-00167  
**Fecha de inicio:** 2000 **Duración:** 4 años

**21 Nombre del proyecto:** Caracterización teórica y diseño de nuevos materiales con propiedades a medida” para aplicaciones tecnológicas: nanotubos y nonoestructuras de boro, carbono y nitrógeno.

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Autonómica

**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Julio Alfonso Alonso  
**Tipo de participación:** Otros  
**Cód. según financiadora:** VA 28/99  
**Fecha de inicio:** 1999 **Duración:** 3 años

**22 Nombre del proyecto:** Sonderforschungsbereich 450: Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen”

**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad Libre de Berlín **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Berlín, Alemania  
**Tipo de participación:** Otros  
**Fecha de inicio:** 1998 **Duración:** 14 años



## Actividades científicas y tecnológicas

### Producción científica

#### Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Alberto Castro. qoqctools: A program for quantum optimal control calculations. Computer Physics Communications. 295, pp. 108983 - 108983. 2024. Disponible en Internet en: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001046523003284>>. ISSN 0010-4655  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2 Alberto Castro; Umberto De Giovannini; Shunsuke A Sato; Hannes Hübener; Angel Rubio. Floquet engineering with quantum optimal control theory. New Journal of Physics. 25 - 4, pp. 043023 - 043023. IOP Publishing, 04/2023. Disponible en Internet en: <<https://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/acb05>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3 Wan-Dong Yu; Hao Liang; Cong-Zhang Gao; Shunsuke A. Sato; Bao-Ren Wei; Alberto Castro; Angel Rubio; Liang-You Peng. Charge transfer in ultrafast isomerization of acetylene ions. Phys. Rev. A. 106, pp. 033111 - 033111. American Physical Society, 09/2022. Disponible en Internet en: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.106.033111>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4 Alberto Castro; Umberto De Giovannini; Shunsuke A. Sato; Hannes Hübener; Angel Rubio. Floquet engineering the band structure of materials with optimal control theory. Phys. Rev. Res.4, pp. 033213 - 033213. American Physical Society, 09/2022. Disponible en Internet en: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.4.033213>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5 Alberto Castro; Adrián García Carrizo; Sebastián Roca; David Zueco; Fernando Luis. Optimal Control of Molecular Spin Qudits. Phys. Rev. Appl.17, pp. 064028 - 064028. American Physical Society, 06/2022. Disponible en Internet en: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.17.064028>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6 J L Alonso; C Bouthelie-Madre; A Castro; J Clemente-Gallardo; J A Jover-Galtier. About the computation of finite temperature ensemble averages of hybrid quantum-classical systems with molecular dynamics. New Journal of Physics. 23 - 6, pp. 063011 - 063011. {IOP} Publishing, 06/2021. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1088/1367-2630/abf9b3>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 7 Adrián García Pueyo; Sergio Blanes; Alberto Castro. Performance of fourth and sixth-order commutator-free Magnus expansion integrators for Ehrenfest dynamics. Computational and Mathematical Methods. 3, pp. e1100. Wiley, 2021.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Autor de correspondencia:** Sí
- 8 Wandong Yu; Cong-Zhang Gao; Shunsuke A. Sato; Alberto Castro; Angel Rubio; Baeron Wei. Single and double charge transfer in the Ne<sup>2+</sup> + He collision within time-dependent density-functional theory. Physical Review A. APS, 2021.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



**Autor de correspondencia:** Sí

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,925

**Posición de publicación:** 21

**Categoría:** Science Edition - OPTICS

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 92

- 9** José Luis Alonso; Alberto Castro; Jesús Clemente-Gallardo; Jorge Jover-Galtier; Carlos Bouthelie. Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems. *Physical Review E*. 102, pp. 042118. 14/10/2020. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.042118>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.296

**Posición de publicación:** 9

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MATHEMATICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 55

- 10** Adrián Gómez Pueyo; Sergio Blanes; Alberto Castro. Propagators for Quantum-Classical Models: Commutator-Free Magnus Methods. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 16 - 3, pp. 1420 - 1430. 10/03/2020.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5.13

**Posición de publicación:** 5

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 37

- 11** Nicolas Tancogne-Dejean; Micael J. T. Oliveira; Xavier Andrade; Heiko Appel; Carlos H. Borca; Guillaume Le Breton; Florian Buchholz; Alberto Castro; Stefano Corni; Alfredo A. Correa; Umberto De Giovannini; Alain Delgado; Florian G. Eich; Johannes Flick; Gabriel Gil; Adrián Gomez; Nicole Helbig; Hannes Hübener; René Jestädt; Joaquim Jornet-Somoza; Ask H. Larsen; Irina V. Lebedeva; Martin Lüders; Miguel A. L. Marques; Sebastian T. Ohlmann; Silvio Pipolo; Markus Rampf; Carlo A. Rozzi; David A. Strubbe; Shunsuke A. Sato; Christian Schäfer; Iris Theophilou; Alicia Welden; Angel Rubio. Octopus, a computational framework for exploring light-driven phenomena and quantum dynamics in extended and finite systems. *The Journal of Chemical Physics*. 152 - 12, pp. 124119 - 124119. 2020. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1063/1.5142502>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.997

**Posición de publicación:** 8

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 34

- 12** Alberto Castro; Heiko Appel; Angel Rubio. Optimal control theory for quantum electrodynamics: an initial state problem. *The European Physical Journal B*. 92, pp. 223. Springer, 10/2019.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1.536

**Posición de publicación:** 46

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Condensed Matter Physics

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 67

- 13** Gomez Pueyo, Adrian; Castro, Alberto. About the relation of electron-electron interaction potentials with exchange and correlation functionals. *EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B*. 91, 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90109-6>>. ISSN 1434-6028

**DOI:** 10.1140/epjb/e2018-90109-6

**Tipo de producción:** Artículo científico





**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1.536  
**Posición de publicación:** 46

**Categoría:** Condensed Matter Physics  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 67

- 14** J. L. Alonso; P. Bruscolini; A. Castro; J. Clemente-Gallardo; J. C. Cuchí; J. A. Jover-Galtier. Ehrenfest Statistical Dynamics in Chemistry: Study of Decoherence Effects. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 14 - 8, pp. 3975 - 3985. 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00511>>. ISSN 1549-9618

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 5.399

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Posición de publicación:** 5

**Num. revistas en cat.:** 37

- 15** Gomez Pueyo, Adrian; Marques, Miguel A. L.; Rubio, Angel; Castro, Alberto. Propagators for the Time-Dependent Kohn-Sham Equations: Multistep, Runge-Kutta, Exponential Runge-Kutta, and Commutator Free Magnus Methods. *JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION*. 14, 2018. ISSN 1549-9618

**DOI:** 10.1021/acs.jctc.8b00197

**PMID:** 29672048

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Índice de impacto:** 5.399

**Num. revistas en cat.:** 37

**Posición de publicación:** 5

- 16** David Kammerlander; Alberto Castro; Miguel Marques. Optimization of the ionization time of an atom with tailored laser pulses: a theoretical study. *The European Physical Journal B*. 90 - 5, pp. 91 - 91. 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2017-70741-4>>. ISSN 1434-6036

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER

**Índice de impacto:** 1.536

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 46

**Num. revistas en cat.:** 67

- 17** Adrián Gómez Pueyo; Jorge A. Budagosky M.; Alberto Castro. Optimal control with nonadiabatic molecular dynamics: Application to the Coulomb explosion of sodium clusters. *Phys. Rev. A*. 94, pp. 063421 - 063421. American Physical Society, 12/2016. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.94.063421>>. ISSN 2469-9926

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - OPTICS

**Índice de impacto:** 2.925

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Posición de publicación:** 21

**Num. revistas en cat.:** 92

- 18** J. A. Budagosky; D. V. Khomitsky; E. Ya. Sherman; Alberto Castro. Shaped electric fields for fast optimal manipulation of electron spin and position in a double quantum dot. *Phys. Rev. B*. 93, pp. 035423 - 035423. American Physical Society, 01/2016. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.035423>>. ISSN 0163-1829

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER



**Índice de impacto:** 3.836  
**Posición de publicación:** 18

**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 67

- 19** Jessica Walkenhorst; Umberto De Giovannini; Alberto Castro; Angel Rubio. Tailored pump-probe transient spectroscopy with time-dependent density-functional theory: controlling absorption spectra. *Eur. Phys. J. B.* 89 - 5, pp. 128 - 128. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2016-70064-0>>. ISSN 1434-6028

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER

**Índice de impacto:** 1.436  
**Posición de publicación:** 45

**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 67

- 20** Alberto Castro. Theoretical Shaping of Femtosecond Laser Pulses for Molecular Photodissociation with Control Techniques Based on Ehrenfest's Dynamics and Time-Dependent Density Functional Theory. *ChemPhysChem.* 17 - 11, pp. 1601 - 1607. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/cphc.201600077>>. ISSN 1439-7641

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 3.075  
**Posición de publicación:** 8

**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 36

- 21** J. L. Alonso; A. Castro; J. Clemente-Gallardo; J. C. Cuchillo; P. Echenique; J. G. Esteve; F. Falceto. Nonextensive thermodynamic functions in the Schrödinger-Gibbs ensemble. *Phys. Rev. E.* 91, pp. 022137 - 022137. American Physical Society, 02/2015. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.022137>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MATHEMATICAL

**Índice de impacto:** 2.252  
**Posición de publicación:** 6

**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 53

- 22** Castro, Alberto; Rubio, Angel; Gross, Eberhard K. U.. Enhancing and controlling single-atom high-harmonic generation spectra: a time-dependent density-functional scheme. *EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B.* 88, 2015. ISSN 1434-6028

**DOI:** 10.1140/epjb/e2015-50889-7  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER

**Índice de impacto:** 1.223  
**Posición de publicación:** 47

**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 67

**Fuente de citas:** WOS

**Citas:** 11

- 23** Xavier Andrade; David Strubbe; Umberto De Giovannini; Ask Hjorth Larsen; Micael J. T. Oliveira; Joseba Alberdi-Rodriguez; Alejandro Varas; Iris Theophilou; Nicole Helbig; Matthieu J. Verstraete; Lorenzo Stella; Fernando Nogueira; Alan Aspuru-Guzik; Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Angel Rubio. Real-space grids and the Octopus code as tools for the development of new simulation approaches for electronic systems. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, pp. 31371 - 31396. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP00351B>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 4.449

**Posición de publicación:** 6

**Fuente de citas:** WOS

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 35

**Citas:** 111

- 24** Jorge A. Budagosky Marcilla; Alberto Castro. Ultrafast single electron spin manipulation in 2D semiconductor quantum dots with optimally controlled time-dependent electric fields through spin-orbit coupling. *Eur. Phys. J. B.* 88 - 1, pp. 15 - 15. 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2014-50700-5>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
- Índice de impacto:** 1.223
- Posición de publicación:** 47
- Tipo de soporte:** Revista
- Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER
- Revista dentro del 25%:** No
- Num. revistas en cat.:** 67
- 25** J. Solanpää; J. A. Budagosky; N. I. Shvetsov-Shilovski; A. Castro; A. Rubio; E. Räsänen. Optimal control of high-harmonic generation by intense few-cycle pulses. *Phys. Rev. A.* 90, pp. 053402 - 053402. American Physical Society, 11/2014. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.053402>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
- Índice de impacto:** 2.808
- Posición de publicación:** 16
- Tipo de soporte:** Revista
- Categoría:** Science Edition - OPTICS
- Revista dentro del 25%:** Sí
- Num. revistas en cat.:** 87
- 26** A Castro; E K U Gross. Optimal control theory for quantum-classical systems: Ehrenfest molecular dynamics based on time-dependent density-functional theory. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.* 47 - 2, pp. 025204 - 025204. 2014. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/1751-8121/47/i=2/a=025204>>. ISSN 1751-8113
- Tipo de producción:** Artículo científico
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
- Índice de impacto:** 1.583
- Posición de publicación:** 16
- Tipo de soporte:** Revista
- Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MATHEMATICAL
- Revista dentro del 25%:** Sí
- Num. revistas en cat.:** 54
- 27** Umberto De Giovannini; Gustavo Brunetto; Alberto Castro; Jessica Walkenhorst; Angel Rubio. Simulating Pump-Probe Photoelectron and Absorption Spectroscopy on the Attosecond Timescale with Time-Dependent Density Functional Theory. *ChemPhysChem.* 14 - 7, pp. 1363 - 1376. WILEY-VCH Verlag, 2013. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/cphc.201201007>>. ISSN 1439-7641
- Tipo de producción:** Artículo científico
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
- Índice de impacto:** 3.360
- Posición de publicación:** 7
- Tipo de soporte:** Revista
- Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
- Revista dentro del 25%:** Sí
- Num. revistas en cat.:** 33
- 28** Alberto Castro. Theoretical Shaping of Femtosecond Laser Pulses for Ultrafast Molecular Photo-Dissociation with Control Techniques Based on Time-Dependent Density Functional Theory. *ChemPhysChem.* 14 - 7, pp. 1488 - 1495. WILEY-VCH Verlag, 2013. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/cphc.201201021>>. ISSN 1439-7641
- Tipo de producción:** Artículo científico
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
- Tipo de soporte:** Revista



**Índice de impacto:** 3.360

**Posición de publicación:** 7

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 33

- 29** Simon Petretti; Alejandro Saenz; Alberto Castro; Piero Decleva. Water molecules in ultrashort intense laser fields. *Chemical Physics*. 414 - 0, pp. 45 - 52. 2013. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010412000237>>. ISSN 0301-0104

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.028

**Posición de publicación:** 16

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 33

- 30** A. Castro; J. Werschnik; E. K. U. Gross. Controlling the Dynamics of Many-Electron Systems from First Principles: A Combination of Optimal Control and Time-Dependent Density-Functional Theory. *Phys. Rev. Lett.* 109, pp. 153603 - 153603. American Physical Society, 10/2012. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.153603>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 7.943

**Posición de publicación:** 5

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 83

- 31** J. L. Alonso; A. Castro; J. Clemente-Gallardo; P. Echenique; J. J. Mazo; V. Polo; A. Rubio; D. Zueco. Non-adiabatic effects within a single thermally averaged potential energy surface: Thermal expansion and reaction rates of small molecules. *The Journal of Chemical Physics*. 137 - 22, pp. 22A533 - 22A533. AIP, 2012. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/137/22A533/1>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.164

**Posición de publicación:** 8

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 34

- 32** A. Castro; M. Isla; Jos@ I. Mart@nez; J.A. Alonso. Scattering of a proton with the Li4 cluster: Non-adiabatic molecular dynamics description based on time-dependent density-functional theory. *Chemical Physics*. 399 - 0, pp. 130 - 134. 2012. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010411002850>>. ISSN 0301-0104

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1.957

**Posición de publicación:** 13

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** physics, at

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 34

- 33** Andrade, X; Alberdi-Rodriguez, J; Strubbe, DA; Oliveira, MJT; Nogueira, F; Castro, A; Muguerza, J; Arruabarrena, A; G. Louie, S; Aspuru-Guzik, A; Rubio, A; A. L. Marques, M. TDDFT in massively parallel computer architectures: the octopus project. *Psi-k Newsletter*, April 2012. 110, 2012. ISSN 0953-8984

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.355

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 20**Num. revistas en cat.:** 68

- 34** Xavier Andrade; Joseba Alberdi-Rodriguez; David A Strubbe; Micael J T Oliveira; Fernando Nogueira; Alberto Castro; Javier Muguerza; Agustin Arruabarrena; Steven G Louie; Alÿn Aspuru-Guzik; Angel Rubio; Miguel A L Marques. Time-dependent density-functional theory in massively parallel computer architectures: the octopus project. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 24 - 23, pp. 233202 - 233202. 2012. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/24/i=23/a=233202>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 35** Alberto Castro; I. V. Tokatly. Quantum optimal control theory in the linear response formalism. *Phys. Rev. A*. 84, pp. 033410 - 033410. American Physical Society, 09/2011. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.033410>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - OPTICS  
**Índice de impacto:** 2.878 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 10 **Num. revistas en cat.:** 79
- 36** David Kammerlander; Alberto Castro; Miguel A. L. Marques. Optimal control of the electronic current density: Application to one- and two-dimensional one-electron systems. *Phys. Rev. A*. 83, pp. 043413 - 043413. American Physical Society, 04/2011. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.043413>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - OPTICS  
**Índice de impacto:** 2.878 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 10 **Num. revistas en cat.:** 79
- 37** Kevin Krieger; Alberto Castro; E.K.U. Gross. Optimization schemes for selective molecular cleavage with tailored ultrashort laser pulses. *Chemical Physics*. 391 - 1, pp. 50 - 61. 2011. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010411001339>>. ISSN 0301-0104  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Índice de impacto:** 1.896 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 15 **Num. revistas en cat.:** 33
- 38** J L Alonso; A Castro; J Clemente-Gallardo; J C Cuchí; P Echenique; F Falceto. Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 44 - 39, pp. 395004 - 395004. 2011. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/1751-8121/44/i=39/a=395004>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 1.564 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 24 **Num. revistas en cat.:** 84
- 39** Simon Petretti; Yulian V. Vanne; Alejandro Saenz; Alberto Castro; Piero Decleva. Alignment-Dependent Ionization of N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and CO<sub>2</sub> in Intense Laser Fields. *Phys. Rev. Lett.* 104, pp. 223001 - 223001. American Physical Society, 06/2010. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.223001>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 7.622 **Revista dentro del 25%:** Sí

**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 80

- 40** J. L. Alonso; A Castro; P Echenique; V Polo; A Rubio; D Zueco. Ab initio molecular dynamics on the electronic Boltzmann equilibrium distribution. *New Journal of Physics*. 12 - 8, pp. 083064 - 083064. 2010. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/1367-2630/12/i=8/a=083064>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.849  
**Posición de publicación:** 9
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 80
- 41** A. Castro; E. Räsänen; C. A. Rozzi. Exact Coulomb cutoff technique for supercell calculations in two dimensions. *Phys. Rev. B*. 80, pp. 033102 - 033102. American Physical Society, 07/2009. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.033102>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.475  
**Posición de publicación:** 12
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Num. revistas en cat.:** 66
- 42** Alberto Castro; E. K. U. Gross. Acceleration of quantum optimal control theory algorithms with mixing strategies. *Phys. Rev. E*. 79, pp. 056704 - 056704. American Physical Society, 05/2009. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.056704>>. ISSN 1063-651X
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.400  
**Posición de publicación:** 5
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MATHEMATICAL  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 47
- 43** A. Castro; E. Räsänen; A. Rubio; E. K. U. Gross. Femtosecond laser pulse shaping for enhanced ionization. *EPL*. 87 - 5, pp. 53001 - 53001. 2009. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/87/53001>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.893  
**Posición de publicación:** 14
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 71
- 44** Xavier Andrade; Alberto Castro; David Zueco; J. L. Alonso; Pablo Echenique; Fernando Falceto; Ángel Rubio. Modified Ehrenfest Formalism for Efficient Large-Scale ab initio Molecular Dynamics. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 5 - 4, pp. 728 - 742. 2009. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct800518j>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4.804  
**Posición de publicación:** 2
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 33



- 45** Silvana Botti; Alberto Castro; Nektarios N. Lathiotakis; Xavier Andrade; Miguel A. L. Marques. Optical and magnetic properties of boron fullerenes. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11, pp. 4523 - 4527. The Royal Society of Chemistry, 2009. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/B902278C>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4.116  
**Posición de publicación:** 3  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 33
- 46** M Awasthi; S Petretti; Y V Vanne; A Saenz; A Castro; P Decleva. Single-active-electron approximation for molecules in strong laser fields : Test application to H 2. *Journal of Physics: Conference Series.* 194 - 2, pp. 022064 - 022064. 2009. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/1742-6596/194/i=2/a=022064>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista
- 47** Alberto Castro; Miguel A.L. Marques; Daniele Varsano; Francesco Sottile; Angel Rubio. The challenge of predicting optical properties of biomolecules: What can we learn from time-dependent density-functional theory?. *Comptes Rendus Physique.* 10 - 6, pp. 469 - 490. 2009. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070508001266>>. ISSN 1631-0705  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1.384  
**Posición de publicación:** 29  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 71
- 48** Silvana Botti; Alberto Castro; Xavier Andrade; Angel Rubio; Miguel A. L. Marques. Cluster-surface and cluster-cluster interactions: Ab initio calculations and modeling of asymptotic van der Waals forces. *Phys. Rev. B.* 78, pp. 035333 - 035333. American Physical Society, 07/2008. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.035333>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.322  
**Posición de publicación:** 10  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 62
- 49** Manohar Awasthi; Yulian V. Vanne; Alejandro Saenz; Alberto Castro; Piero Decleva. Single-active-electron approximation for describing molecules in ultrashort laser pulses and its application to molecular hydrogen. *Phys. Rev. A.* 77, pp. 063403 - 063403. American Physical Society, 06/2008. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.063403>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.908  
**Posición de publicación:** 6  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - OPTICS  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 64
- 50** E. Räsänen; A. Castro; E. K. U. Gross. Electron localization function for two-dimensional systems. *Phys. Rev. B.* 77, pp. 115108 - 115108. American Physical Society, 03/2008. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.115108>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.322  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Revista dentro del 25%:** Sí

**Posición de publicación:** 10

**Num. revistas en cat.:** 62

- 51** E. Räsänen; A. Castro; J. Werschnik; A. Rubio; E. K. U. Gross. Optimal laser control of double quantum dots. Phys. Rev. B. 77, pp. 085324 - 085324. American Physical Society, 02/2008. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.085324>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.322  
**Posición de publicación:** 10
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 62
- 52** E. Räsänen; A. Castro; J. Werschnik; A. Rubio; E.K.U. Gross. Coherent quantum switch driven by optimized laser pulses. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 40 - 5, pp. 1593 - 1595. 2008. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138694770700598X>>. ISSN 1386-9477
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1.230  
**Posición de publicación:** 34
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 62
- 53** Micael J.T. Oliveira; Alberto Castro; Miguel A.L. Marques; Angel Rubio. On the Use of Neumann's Principle for the Calculation of the Polarizability Tensor of Nanostructures. Journal of Nanoscience and Nanotechnology. 8 - 7, pp. 3392 - 3398. 2008. Disponible en Internet en: <<http://www.ingentaconnect.com/content/asp/jnn/2008/00000008/00000007/art00013>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1.929  
**Posición de publicación:** 48
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 192
- 54** Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Aldo H. Romero; Micael J. T. Oliveira; Angel Rubio. The role of dimensionality on the quenching of spin-orbit effects in the optics of gold nanostructures. The Journal of Chemical Physics. 129 - 14, pp. 144110 - 144110. AIP, 2008. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/129/144110/1>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.149  
**Posición de publicación:** 5
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 31
- 55** E. Räsänen; A. Castro; J. Werschnik; A. Rubio; E. K. U. Gross. Optimal Control of Quantum Rings by Terahertz Laser Pulses. Phys. Rev. Lett.98, pp. 157404 - 157404. American Physical Society, 04/2007. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.157404>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 6.994  
**Posición de publicación:** 5
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 69





C

V

n

CURRÍCULUM VÍTAE NORMALIZADO

59314a816431b63a44c20085d6f8dd55

- 56** J. I. Martínez; Alberto Castro; Julio A. Alonso. Density functional study of the structural and electronic properties of aluminium-lithium clusters. *Journal of Computational Methods in Science and Engineering*. 7, pp. 355 - 372. 2007. Disponible en Internet en: <<https://content.iospress.com/articles/journal-of-computational-methods-in-sciences-and-engineering/jcm00192>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 57** Miguel A. L. Marques; Alberto Castro; Giuliano Mallocci; Giacomo Mulas; Silvana Botti. Efficient calculation of van der Waals dispersion coefficients with time-dependent density functional theory in real time: Application to polycyclic aromatic hydrocarbons. *The Journal of Chemical Physics*. 127 - 1, pp. 014107 - 014107. AIP, 2007. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/127/014107/1>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Índice de impacto:** 3.044 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 5 **Num. revistas en cat.:** 32
- 58** J.I. Martínez; A. Castro; A. Rubio; J.A. Alonso. Optical Absorption Spectra of V+4 Isomers: One Example of First-Principles Theoretical Spectroscopy with Time-Dependent Density Functional Theory. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 3 - 5, pp. 761 - 766. 2006. Disponible en Internet en: <<http://www.ingentaconnect.com/content/asp/jctn/2006/00000003/00000005/art00014>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Materials Science, Multidisciplinary  
**Índice de impacto:** 1.666 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 131 **Num. revistas en cat.:** 271
- 59** J. I. Martínez; A. Castro; A. Rubio; J. A. Alonso. Photoabsorption spectra of Ti[sub 8]C[sub 12] metallocarbohedrynes: Theoretical spectroscopy within time-dependent density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*. 125 - 7, pp. 074311 - 074311. AIP, 2006. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/125/074311/1>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Índice de impacto:** 3.166 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 3 **Num. revistas en cat.:** 31
- 60** Alberto Castro; Heiko Appel; Micael Oliveira; Carlo A. Rozzi; Xavier Andrade; Florian Lorenzen; M. A. L. Marques; E. K. U. Gross; Angel Rubio. octopus: a tool for the application of time-dependent density functional theory. *physica status solidi (b)*. 243 - 11, pp. 2465 - 2488. WILEY-VCH Verlag, 2006. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/pssb.200642067>>. ISSN 1521-3951  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - PHYSICS, CONDENSED MATTER  
**Índice de impacto:** 0.967 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 39 **Num. revistas en cat.:** 58  
**Fuente de citas:** WOS **Citas:** 489
- 61** Castro, A; Appel, H; Oliveira, M; Rozzi, CA; Andrade, X; Lorenzen, F; Marques, MAL; Gross, EKV; Rubio, A. octopus: a tool for the application of time-dependent density functional theory. *Psi-k Newsletter*, February 2006. 73, 2006.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 62** X Lopez; MAL Marques; A Castro; A Rubio. Optical absorption of the blue fluorescent protein: A first-principles study. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 127 - 35, pp. 12329 - 12337. AMER CHEMICAL SOC, 09/2005. ISSN 0002-7863  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 7.419  
**Posición de publicación:** 6  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Chemistry, Multidisciplinary  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 125
- 63** Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Julio A. Alonso; Angel Rubio. Optical Properties of Nanostructures from Time-Dependent Density Functional Theory. JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE. 1 - 3, pp. 231 - 255. AMER SCIENTIFIC PUBLISHERS, 09/2004. ISSN 1546-1955  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista
- 64** A Castro; MAL Marques; JA Alonso; GF Bertsch; A Rubio. Excited states dynamics in time-dependent density functional theory - High-field molecular dissociation and harmonic generation. EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D. 28 - 2, pp. 211 - 218. SPRINGER-VERLAG, 02/2004. ISSN 1434-6060  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1.692  
**Posición de publicación:** 16  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Physics, Atomic, Molecular and Chemical  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 34
- 65** J.I. Martínez; A. Castro; A. Rubio; J.M. Poblet; J.A. Alonso. Calculation of the optical spectrum of the Ti8C12 and V8C12 Met-Cars. Chemical Physics Letters. 398 - 4-6, pp. 292 - 296. 2004. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261404014459>>. ISSN 0009-2614  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.438  
**Posición de publicación:** 8  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Physics, Atomic, Molecular and Chemical  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 34
- 66** Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Angel Rubio. Propagators for the time-dependent Kohn-Sham equations. The Journal of Chemical Physics. 121 - 8, pp. 3425 - 3433. AIP, 2004. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/121/3425/1>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.105  
**Posición de publicación:** 5  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Physics, Atomic, Molecular and Chemical  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 34
- 67** Miguel A. L. Marques; Xabier Lopez; Daniele Varsano; Alberto Castro; Angel Rubio. Time-Dependent Density-Functional Approach for Biological Chromophores: The Case of the Green Fluorescent Protein. Phys. Rev. Lett. 90, pp. 258101 - 258101. American Physical Society, 06/2003. Disponible en Internet en: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.258101>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 7.035  
**Posición de publicación:** 4  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Physics, Multidisciplinary  
**Revista dentro del 25%:** Sí  
**Num. revistas en cat.:** 68



- 68** A Castro; A Rubio; M J Stott. Solution of Poisson's equation for finite systems using plane-wave methods. Canadian Journal of Physics. 81 - 10, pp. 1151 - 1164. 2003. Disponible en Internet en: <<http://www.nrcresearchpress.com/doi/abs/10.1139/p03-078>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Physics, Multidisciplinary  
**Índice de impacto:** 0.777 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 39 **Num. revistas en cat.:** 68
- 69** Miguel A.L. Marques; Alberto Castro; George F. Bertsch; Angel Rubio. octopus: a first-principles tool for excited electron-ion dynamics. Computer Physics Communications. 151 - 1, pp. 60 - 78. 2003. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465502006860>>. ISSN 0010-4655  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Computer Science, Interdisciplinary Applications  
**Índice de impacto:** 1.170 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 18 **Num. revistas en cat.:** 83
- 70** Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Julio A. Alonso; George F. Bertsch; K. Yabana; Angel Rubio. Can optical spectroscopy directly elucidate the ground state of C[sub 20]? The Journal of Chemical Physics. 116 - 5, pp. 1930 - 1933. AIP, 2002. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/116/1930/1>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Physics, Atomic, Molecular and Chemical  
**Índice de impacto:** 2.998 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 5 **Num. revistas en cat.:** 31
- 71** M. A. L. Marques; Alberto Castro; Angel Rubio. Assessment of exchange-correlation functionals for the calculation of dynamical properties of small clusters in time-dependent density functional theory. The Journal of Chemical Physics. 115 - 7, pp. 3006 - 3014. AIP, 2001. Disponible en Internet en: <<http://link.aip.org/link/?JCP/115/3006/1>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Physics, Atomic, Molecular and Chemical  
**Índice de impacto:** 3.147 **Revista dentro del 25%:** Sí  
**Posición de publicación:** 5 **Num. revistas en cat.:** 30
- 72** Alberto Castro. Optimal Control Theory for Electronic Structure Methods. Handbook of Materials Modeling. Methods: Theory and Modeling. pp. 1 - 21. Springer International Publishing, 2018. Disponible en Internet en: <[https://doi.org/10.1007/978-3-319-42913-7\\_4-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42913-7_4-1)>. ISBN 978-3-319-42913-7  
**Tipo de producción:** Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro  
**Autor de correspondencia:** Sí
- 73** Umberto de Giovannini; Alberto Castro. Real-Time and Real-Space Time-Dependent Density-Functional Theory Approach to Attosecond Dynamics. Chemistry and Molecular Physics on the Attosecond Timescale: Theoretical Approaches. pp. 424 - 461. Springer, 2018. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/9781788012669-00424>>. ISBN 978-1-78262-995-5  
**Tipo de producción:** Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro  
**Autor de correspondencia:** No
- 74** Alberto Castro Barrigón. Analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory: new developments in the octopus code. Proceedings of the 13th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering. 2, pp. 389 - 399. 24/06/2013. Disponible



en Internet en: <<http://cmmse.usal.es/cmmse2016/sites/default/files/volumes/volume2-cmmse-20013.pdf>>. ISBN 978-84-616-2723-3

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Libro

**Posición de firma:** 1

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de capítulo de libro

- 75** JosÃ© Alonso; Alberto Castro; Pablo Echenique; Angel Rubio. On the Combination of TDDFT with Molecular Dynamics: New Developments. 837, pp. 301 - 315. Springer Berlin / Heidelberg, 2012. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-23518-4\\_15](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-23518-4_15)>. ISBN 978-3-642-23517-7
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 76** Alberto Castro; Eberhard Gross. Quantum Optimal Control. 837, pp. 265 - 276. Springer Berlin / Heidelberg, 2012. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-23518-4\\_13](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-23518-4_13)>. ISBN 978-3-642-23517-7
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 77** Julio A. Alonso; Alberto Castro; Angel Rubio. Ab initio modelling of the excited state dynamics of clusters with time-dependent density-functional theory: linear and nonlinear regimes. Nanoclusters and Nanostructured Surfaces. pp. 79 - 142. American Scientific Publishers, California, 2010. Disponible en Internet en: <<http://www.aspbs.com/nc.htm#contents>>. ISBN 1-58883-182-5
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 78** Claus Peter Schulz; Tobias Burnus; Alberto Castro; E.K.U. Gross; Andreas Heidenreich; Ingolf V. Hertel; Joshua Jortner; Tim Laermann; Isidore Last; Robert J. Levis; Miguel A. L. Marques; Dmitri A. Romanov; Alejandro Saenz. Molecules and clusters in strong laser fields. Analysis and Control of Ultrafast Photoinduced Reactions, Springer Series in Chemical Physics. 87, pp. 485 - 617. Springer Berlin Heidelberg, 2007. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-68038-3\\_6](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-68038-3_6)>. ISBN 978-3-540-68038-3
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 79** A. Castro; M.A.L. Marques. Propagators for the Time-Dependent Kohn-Sham Equations. Time-dependent Density Functional Theory, Lecture Notes in Physics. 706, pp. 197 - 210. Springer Berlin / Heidelberg, 2006. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1007/3-540-35426-3\\_12](http://dx.doi.org/10.1007/3-540-35426-3_12)>. ISBN 978-3-540-35422-2
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- Fuente de citas:** SCOPUS
- Citas:** 13
- 80** Alberto Castro; Miguel A. L. Marques; Xavier Lopez; Daniele Varsano; Angel Rubio. Excited states properties of nanostructures and biomolecules through time dependent density functional theory. Modeling and Simulating Materials Nanoworld. 44, pp. 329 - 336. Techna Group / Faenza, 2004. ISBN 88-86538-47-2
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 81** Fernando Nogueira; Alberto Castro; Miguel Marques. A Tutorial on Density Functional Theory. A Primer in Density Functional Theory, Lecture Notes in Physics. 620, pp. 218 - 256. Springer Berlin / Heidelberg, 2003. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1007/3-540-37072-2\\_6](http://dx.doi.org/10.1007/3-540-37072-2_6)>. ISBN 978-3-540-03083-6
- Tipo de producción:** Capítulo de libro
- Tipo de soporte:** Libro
- 82** TDDFT for nanostructures and biomolecules. (Alemania): LAP Lambert Academic Publishing, 2011. Disponible en Internet en: <<https://www.morebooks.de/store/gb/book/tddft-for-nanostructures-and-biomolecules/isbn/978-3-8465-5402-9>>. ISBN 978-3-8465-5402-9
- Tipo de producción:** Libro o monografía científica
- Tipo de soporte:** Libro



## Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Floquet engineering the band structure of materials with optimal control theory  
**Nombre del congreso:** DPG Meeting of the Condensed Matter Section 2022  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Regensburg, Alemania  
**Fecha de celebración:** 04/09/2022  
**Fecha de finalización:** 09/09/2022  
**Entidad organizadora:** Sociedad Alemana de Física **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
Alberto Castro Barrigón.
- 2** **Título del trabajo:** Floquet engineering the band structure of materials with optimal control theory  
**Nombre del congreso:** PsiK Conferene  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Lausanne, Suiza  
**Fecha de celebración:** 22/08/2022  
**Fecha de finalización:** 25/08/2022  
**Entidad organizadora:** PsiK Network **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
Alberto Castro Barrigón.
- 3** **Título del trabajo:** Optimal Control of Molecular Spin Qdits  
**Nombre del congreso:** XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Murcia, Región de Murcia, España  
**Fecha de celebración:** 11/07/2022  
**Fecha de finalización:** 15/07/2022  
**Entidad organizadora:** REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE FISICA  
Alberto Castro Barrigón.
- 4** **Título del trabajo:** Floquet engineering the band structure of materials with optimal control theory  
**Nombre del congreso:** 25th ETSF Workshop on Electronic Excitations  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación (comunicación oral)  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Leuven, Bélgica  
**Fecha de celebración:** 13/06/2022  
**Fecha de finalización:** 17/06/2022  
**Entidad organizadora:** European Theoretical Spectroscopy Facility  
Alberto Castro Barrigón.



- 5** **Título del trabajo:** Ehrenfest Molecular Dynamics with Time-Dependent Density-Functional Theory: In and out of equilibrium  
**Nombre del congreso:** First Annual Workshop of the COST Action CA18222  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Online,  
**Fecha de celebración:** 09/09/2020  
**Fecha de finalización:** 11/11/2020  
**Entidad organizadora:** Cost Action CA18222  
Alberto Castro Barrigón. Disponible en Internet en: <<http://atom.ubbcluj.ro/attochem/>>.
- 6** **Título del trabajo:** Quantum-classical molecular dynamics in the canonical ensemble  
**Nombre del congreso:** 24th ETSF Workshop on Electronic Excitations: Light-matter interaction and optical spectroscopy from infrared to X-rays  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Jena, Alemania  
**Fecha de celebración:** 16/09/2019  
**Fecha de finalización:** 20/09/2019  
**Entidad organizadora:** European Theoretical Spectroscopy Facility  
Alberto Castro.
- 7** **Título del trabajo:** Ehrenfest dynamics, in & out of equilibrium  
**Nombre del congreso:** 2019 Workshop on Time-Dependent Density-Functional Theory: Excited States and Dynamics  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** New Brunswick (NJ), Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 11/08/2019  
**Fecha de finalización:** 14/08/2019  
**Entidad organizadora:** Rutgers University  
Alberto Castro.
- 8** **Título del trabajo:** Optimal control theory for quantum electrodynamics: an initial state problem  
**Nombre del congreso:** XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Zaragoza, España  
**Fecha de celebración:** 15/07/2019  
**Fecha de finalización:** 19/07/2019  
**Entidad organizadora:** REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE FISICA  
Alberto Castro.
- 9** **Título del trabajo:** Commutator-free Magnus Propagators for Quantum - Classical Molecular Dynamics  
**Nombre del congreso:** 2019 International Conference on Computational & Mathematical Methods in Science & Engineering  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Cadiz, España



**Fecha de celebración:** 30/06/2019

**Fecha de finalización:** 05/07/2019

Alberto Castro.

- 10** **Título del trabajo:** Propagators for the non-linear time-dependent equations in quantum many-body theory  
**Nombre del congreso:** 23rd Workshop on Electronic Excitations  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Milán, Italia  
**Fecha de celebración:** 10/09/2018  
**Fecha de finalización:** 14/09/2018  
**Entidad organizadora:** European Theoretical Spectroscopy Facility  
**Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
Alberto Castro Barrigón.
- 11** **Título del trabajo:** Brief Reports on: (1) Control for Quantum Optics Processes; and (2) Propagators for the time-dependent Kohn-Sham equations  
**Nombre del congreso:** Excited States: Electronic Structure and Dynamics  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Telluride, CO, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/07/2017  
**Fecha de finalización:** 21/07/2017  
**Entidad organizadora:** Telluride Science Research Center  
**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación  
**Ciudad entidad organizadora:** Telluride, Estados Unidos de América  
Alberto Castro Barrigón.
- 12** **Título del trabajo:** Control of electronic dynamics  
**Nombre del congreso:** PsiK Conference  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Intervención por:** Por invitación  
**Ciudad de celebración:** San Sebastian, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 06/09/2015  
**Fecha de finalización:** 10/09/2015  
**Entidad organizadora:** Psik Network  
Alberto Castro.
- 13** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control Theory for Hamiltonian Modeling of Many-Electron Problems  
**Nombre del congreso:** CECAM/Psik Research Conference: Frontiers of First Principles Simulation; Materials Design and Discovery  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania  
**Fecha de celebración:** 01/02/2015  
**Fecha de finalización:** 05/02/2015  
**Entidad organizadora:** CECAM  
**Con comité de admisión ext.:** Sí  
Alberto Castro.



- 14** **Título del trabajo:** Optimization of ultra-fast molecular photo-dissociation: Theoretical pulse shaping with time-dependent density-functional theory and Ehrenfest dynamics  
**Nombre del congreso:** ATTOFEL; Free electron lasers and attosecond light sources: portals to ultra-fast dynamics in AMO systems  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación  
**Ciudad de celebración:** Londres, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 30/06/2014  
**Fecha de finalización:** 02/07/2014  
**Entidad organizadora:** University College London **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Londres, Reino Unido  
Alberto Castro Barrigón.
- 15** **Título del trabajo:** Optimization of ultra-fast molecular photo-dissociation: Theoretical pulse shaping with time-dependent density-functional theory and Ehrenfest dynamics  
**Nombre del congreso:** COST XLIC Working Group 1 Meeting  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster **Intervención por:** Revisión previa a la aceptación  
**Ciudad de celebración:** London, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 03/06/2014  
**Fecha de finalización:** 04/06/2014  
**Entidad organizadora:** XLIC COST Network **Tipo de entidad:** Red de investigación  
Alberto Castro Barrigón.
- 16** **Título del trabajo:** From the femto- to the atto-second time scale: analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory  
**Nombre del congreso:** Psik-CECAM Research Conference: Multiscale Modeling from First Principles  
**Ciudad de celebración:** Platja d'Aro, Cataluña, España  
**Fecha de celebración:** 09/09/2013  
**Fecha de finalización:** 13/09/2013  
**Entidad organizadora:** Psik-CECAM  
Alberto Castro.
- 17** **Título del trabajo:** Progress in the control of electron systems  
**Nombre del congreso:** Gordon Research Conference on Time Dependent Density Functional Theory  
**Ciudad de celebración:** Biddeford ME, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 11/08/2013  
**Fecha de finalización:** 16/08/2013  
**Entidad organizadora:** Gordon Research Institute **Tipo de entidad:** Fundación  
Alberto Castro Barrigón.
- 18** **Título del trabajo:** Analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory: new developments in the octopus code  
**Nombre del congreso:** 13th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación  
**Ciudad de celebración:** Almería, Andalucía, España  
**Fecha de celebración:** 24/06/2013  
**Fecha de finalización:** 27/06/2013  
**Entidad organizadora:** CMMSE





**Publicación en acta congreso:** Sí

**Con comité de admisión ext.:** Sí

Alberto Castro Barrigón. "Analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory: new developments in the octopus code". En: Proceedings of the 13th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering. 2, pp. 389 - 399. ISBN 978-84-616-2723-3

- 19 Título del trabajo:** Non-adiabatic effects within a single thermally-averaged potential energy surface: Thermal expansion and reaction rates of small molecules  
**Nombre del congreso:** 17th ETSF Workshop on Electronic Excitations  
**Ciudad de celebración:** Coimbra, Portugal  
**Fecha de celebración:** 02/10/2012  
**Fecha de finalización:** 05/10/2012  
**Entidad organizadora:** European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF)      **Tipo de entidad:** Centro de I+D
- 20 Título del trabajo:** Optimization of Materials with Time-Dependent Density-Functional Theory  
**Nombre del congreso:** XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography  
**Tipo evento:** Congreso      **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 22/08/2011  
**Entidad organizadora:** International Union of Crystallography      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
- 21 Título del trabajo:** Time-Dependent Density-Functional Theory and its Rôle in o Quantum Control  
**Nombre del congreso:** Quantum Control  
**Tipo evento:** Congreso      **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Banff, Canadá  
**Fecha de celebración:** 04/04/2011  
**Entidad organizadora:** Banff Internation Research Station      **Tipo de entidad:** Fundación
- 22 Título del trabajo:** First Principles Modeling with Octopus: Massive Parallelization Towards Peta?op Computing and More  
**Nombre del congreso:** RES Scienti?c Seminar of Parallel Simulations in the Network  
**Tipo evento:** Jornada      **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Zaragoza, Aragón, España  
**Fecha de celebración:** 30/11/2010  
**Entidad organizadora:** Red Española de Supercomputación      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
- 23 Título del trabajo:** Control of mixed quantum-classical dynamics with Time Dependent Density Functional Theory  
**Nombre del congreso:** 3rd Annual Workshop of the COST Action CM072 – Chemistry with Ultrashort Pulses and Free Electron Pulses (CUSPFEL)  
**Tipo evento:** Congreso      **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Creta, Grecia  
**Fecha de celebración:** 20/10/2010  
**Entidad organizadora:** COST      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones



- 24** **Título del trabajo:** Ab Initio Control of the Evolution of Many Electron Systems based on Time Dependent Density Functional Theory  
**Nombre del congreso:** 2010 Psi-k Conference  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania  
**Fecha de celebración:** 12/09/2010  
**Entidad organizadora:** Psi-k **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
- 25** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control Theory Theory with Time Dependent Density Functional Theory  
**Nombre del congreso:** Workshop on Time-dependent quantum mechanics – analysis and numerics”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Oslo, Noruega  
**Fecha de celebración:** 28/04/2010
- 26** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control Theory with Time-Dependent Density-Functional Theory  
**Nombre del congreso:** International Workshop on Atomic Physics  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 23/11/2009  
**Entidad organizadora:** Max-Planck Institute **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad organizadora:** Alemania
- 27** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control with Time Dependent Density Functional Theory  
**Nombre del congreso:** ETSF Workshop on Electronic Excitations  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Evora, Portugal  
**Fecha de celebración:** 13/09/2009  
**Entidad organizadora:** European Theoretical Spectroscopy Facility **Tipo de entidad:** Centro de I+D
- 28** **Título del trabajo:** Tailoring High-Order Harmonics: A Computational Approach Based on Time-Dependent Density-Functional Theory  
**Nombre del congreso:** 2009 Spring Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 23/07/2009  
**Entidad organizadora:** Deutsche Physikalische Gesellschaft **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Ciudad entidad organizadora:** Alemania
- 29** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control Theory with Time-Dependent Density-Functional Theory  
**Nombre del congreso:** Gordon Research Conference on Time-dependent density-functional theory”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote



**Ciudad de celebración:** New London, New Hampshire, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 05/07/2009  
**Entidad organizadora:** Gordon Research Conferences  
**Tipo de entidad:** Fundación  
**Ciudad entidad organizadora:** Estados Unidos de América

**30** **Título del trabajo:** Tailoring High-Order Harmonics: A Computational Approach Based on Time-Dependent Density-Functional Theory  
**Nombre del congreso:** APS March Meeting  
**Tipo evento:** Congreso  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Pittsburgh, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 16/03/2009  
**Entidad organizadora:** American Physical Society  
**Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Ciudad entidad organizadora:** Estados Unidos de América

**31** **Título del trabajo:** Quantum Optimal Control for Photo-chemistry?  
**Nombre del congreso:** IV Congreso Nacional BIFI 2009  
**Tipo evento:** Congreso  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Zaragoza, Aragón, España  
**Fecha de celebración:** 05/02/2009  
**Entidad organizadora:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos  
**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad organizadora:** Zaragoza, Aragón, España

**32** **Título del trabajo:** Introduction to time-dependent density-functional theory & quantum optimal control theory  
**Nombre del congreso:** NANOQUANTA-ETSF 5th Young Researcher's Meeting  
**Tipo evento:** Congreso  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Modena, Italia  
**Fecha de celebración:** 20/05/2008

**33** **Título del trabajo:** Optimal control of many-electron systems with time-dependent density-functional  
**Nombre del congreso:** 2008 Spring Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft" (DPG, German Physical Society) Condensed Matter Division: Symposium on Driven Soft Matter: Non-equilibrium phenomena in external fields"  
**Tipo evento:** Congreso  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania  
**Fecha de celebración:** 25/02/2008  
**Entidad organizadora:** Deutsche Physikallische Gesellschaft  
**Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones

**34** **Título del trabajo:** Optimal control of many-electron systems with time- dependent density-functional theory  
**Nombre del congreso:** The Minerva-Gentner Symposium on Time-Dependent Density Functional Theory  
**Tipo evento:** Congreso  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Eilat, Israel  
**Fecha de celebración:** 16/12/2007



- 35** **Título del trabajo:** Time-dependent electron localisation function: A tool to visualise and analyse ultrafast processes  
**Nombre del congreso:** 11th Nanoquanta Workshop on Electronic Excitations  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Houffalize, Bélgica  
**Fecha de celebración:** 19/06/2006
- 36** **Título del trabajo:** Time-dependent density-functional theory to describe processes in the high intensity ?eld regime  
**Nombre del congreso:** NANOQUANTA Young Researcher's Meeting  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Roma, Italia  
**Fecha de celebración:** 03/05/2006
- 37** **Título del trabajo:** Some computational techniques for ?rst-principles simulations on condensed-matter systems  
**Nombre del congreso:** Spring Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft" (DPG, German Physical Society) Condensed Matter Division  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 27/03/2006
- 38** **Título del trabajo:** Useful computational tools for the implementation of TDDFT: Adaptive coordinates and real-space domain parallelization  
**Nombre del congreso:** International Workshop on Atomic Physics. Focus Days on Electronic correlation in atomic and molecular physics  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 28/11/2005
- 39** **Título del trabajo:** Clusters and molecules in intense laser pulses: A computational approach based on time-dependent density functional theory  
**Nombre del congreso:** Workshop: Cluster System Molekül"  
**Tipo evento:** Jornada **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania  
**Fecha de celebración:** 21/06/2005
- 40** **Título del trabajo:** The octopus package  
**Nombre del congreso:** EXCITING Symposium on Excited-state properties of solids"  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Mannheim, Alemania  
**Fecha de celebración:** 16/05/2005



- 41** **Título del trabajo:** TDDFT for the description of the high-?eld irradiation of clusters or molecules  
**Nombre del congreso:** Mini workshop Some results from time-dependent density functional theory”  
**Tipo evento:** Jornada **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Coimbra, Portugal  
**Fecha de celebración:** 06/05/2005
- 42** **Título del trabajo:** Clusters and molecules in intense laser pulses: A computational approach based on time-dependent density functional theory  
**Nombre del congreso:** 2005 Spring Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft” (DPG, German Physical Society). Condensed Matter Division.  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania  
**Fecha de celebración:** 04/03/2005  
**Entidad organizadora:** Deutsche Physikalische Gesellschaft
- 43** **Título del trabajo:** Clusters and molecules in intense laser pulses: A computational approach based on time-dependent density functional theory  
**Nombre del congreso:** 340th Wilhelm und Else Heraeus-Seminar High ?eld Attosecond Physics”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Obergurgl, Austria  
**Fecha de celebración:** 09/01/2005
- 44** **Título del trabajo:** A computational approach, based on TDDFT, to the description of high-intensity irradiation of clusters and molecules  
**Nombre del congreso:** International Workshop on "Atomic Physics"  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 01/12/2004
- 45** **Título del trabajo:** Excited states properties of nanostructures and biomolecules through time-dependent density functional theory  
**Nombre del congreso:** 3rd International Conference Computational Modeling and Simulation of Materials” and Special Symposium Modeling and Simulating Materials Nanoworld”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Acireale, Sicilia, Italia  
**Fecha de celebración:** 30/05/2004
- 46** **Título del trabajo:** Investigating phenomena related to electronic excited states through time dependent density functional theory: Some examples  
**Nombre del congreso:** International Conference on Ab-initio Electrons Excitations Theory: Towards Systems of Biological Interest”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación  
**Ciudad de celebración:** San Sebastián, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 21/09/2003



- 47** **Título del trabajo:** Optical properties of nanostructures: a first principles approach  
**Nombre del congreso:** Towards atomic scale-and-time resolution at interfaces  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote **Intervención por:** Por invitación  
**Ciudad de celebración:** San Sebastián, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 01/07/2002
- 48** **Título del trabajo:** Interaction of light with clusters within a real-space, real time TDDFT framework.  
**Nombre del congreso:** Total energy methods in computational condensed matter  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Tenerife, Canarias, España  
**Fecha de celebración:** 10/01/2002
- 49** **Título del trabajo:** Computational aspects of time-dependent density-functional theory  
**Nombre del congreso:** Workshop Numerical Methods in Density Functional Theory”  
**Tipo evento:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania  
**Entidad organizadora:** Technical University of Berlin, MATHEON **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Berlín, Alemania

## Actividades de divulgación

- 1** **Título del trabajo:** Coloquio en la Universidad de Jyväskylä: Quantum Optimal Control Theory to Steer Laser-Molecule Interactions: Ionization, Dissociation, and High Harmonic Generation”  
**Nombre del evento:** Coloquio  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Jyväskylä, Finlandia  
**Fecha de celebración:** 07/11/2008  
**Entidad organizadora:** Universidad de Jyväskylä  
**Ciudad entidad organizadora:** Jyväskylä, Finlandia
- 2** **Título del trabajo:** Coloquio en el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI): The challenge of predicting optical properties of biomolecules: what can we learn from time-dependent density-functional theory?”  
**Nombre del evento:** Coloquio  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Zaragoza, España  
**Fecha de celebración:** 09/07/2008  
**Entidad organizadora:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
- 3** **Título del trabajo:** Coloquio en la Universidad Libre de Berlín: A Primer in Density Functional Theory”  
**Nombre del evento:** Coloquio  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania  
**Fecha de celebración:** 22/06/2006  
**Entidad organizadora:** Universidad Libre de Berlín

Ciudad entidad organizadora: Berlín, Alemania

## Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

### Organización de actividades de I+D+i

- 1** **Título de la actividad:** 9th School and Workshop on Time Dependent Density Functional Theory  
**Tipo de actividad:** Organización de congresos **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Benasque Center for Science **Tipo de entidad:** Fundación  
**Ciudad entidad convocante:** Benasque, España  
**Fecha de inicio-fin:** 19/10/2022 - 27/10/2022 **Duración:** 10 días
- 2** **Título de la actividad:** 8th School and Workshop on Time Dependent Density Functional Theory  
**Tipo de actividad:** Organización de congresos **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Benasque Center for Science **Tipo de entidad:** Fundación  
**Ciudad entidad convocante:** Benasque, España  
**Fecha de inicio-fin:** 20/08/2018 - 31/12/2018 **Duración:** 11 días
- 3** **Título de la actividad:** 7th School and Workshop on Time Dependent Density Functional Theory, Centro de Ciencias Pedro Pascual, Benasque, Spain  
**Tipo de actividad:** Organización de congresos **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Fecha de inicio-fin:** 11/09/2016 - 23/09/2016 **Duración:** 12 días
- 4** **Título de la actividad:** 19th ETSF Workshop on Electronic Excitations: Complex systems in Biology and Nanoscience  
**Tipo de actividad:** Workshop **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** European Theoretical Spectroscopy Facility **Tipo de entidad:** Red de Investigadores Europea  
**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España  
**Fecha de inicio-fin:** 23/09/2014 - 26/09/2014
- 5** **Título de la actividad:** European School on Molecular Excited States  
**Tipo de actividad:** School **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Entidad convocante:** CECAM **Tipo de entidad:** Centro de I+D  
**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España  
**Fecha de inicio-fin:** 05/05/2014 - 09/05/2014
- 6** **Título de la actividad:** VI International Conference BIFI 2014: Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics  
**Tipo de actividad:** Conferencia **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Entidad convocante:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España  
**Fecha de inicio-fin:** 22/01/2014 - 24/01/2014
- 7** **Título de la actividad:** 6th School & Workshop on Time-Dependent Density-functional Theory: Prospects and Applications  
**Tipo de actividad:** School and Workshop **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Benasque Center for Science **Tipo de entidad:** Fundación  
**Ciudad entidad convocante:** Benasque (Huesca), Aragón, España



**Fecha de inicio-fin:** 04/01/2014 - 18/01/2014

**8 Título de la actividad:** Molecular Excited States

**Tipo de actividad:** School

**Entidad convocante:** CECAM

**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 08/04/2013 - 12/04/2013

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Centro de I+D

**9 Título de la actividad:** VI National Conference BIFI 2013

**Tipo de actividad:** Conferencia

**Entidad convocante:** Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 30/01/2013 - 02/02/2013

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación

**10 Título de la actividad:** Molecular Excited States

**Tipo de actividad:** School

**Entidad convocante:** CECAM

**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 04/06/2012 - 08/06/2012

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Centro de I+D

**11 Título de la actividad:** 5th School & Workshop on Time-Dependent Density-functional Theory: Prospects and Applications

**Tipo de actividad:** Escuela & Workshop

**Entidad convocante:** Benasque Center for Science

**Ciudad entidad convocante:** Benasque (Huesca), Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 03/01/2012 - 17/01/2012

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Fundación

**12 Título de la actividad:** CECAM Tutorial: Basic techniques and tools for the development of atomic-scale software

**Tipo de actividad:** Tutorial

**Entidad convocante:** CECAM

**Ciudad entidad convocante:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio-fin:** 21/06/2010 - 25/06/2010

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Centro de I+D

**13 Título de la actividad:** Young Researcher's Meeting

**Tipo de actividad:** Workshop

**Entidad convocante:** European Theoretical Spectroscopy Facility

**Ciudad entidad convocante:** Berlín, Alemania

**Fecha de inicio-fin:** 13/06/2009 - 18/06/2009

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Red de Investigadores Europea

**14 Título de la actividad:** CECAM Tutorial: Basic techniques and tools for the development of atomic-scale software

**Tipo de actividad:** Tutorial

**Entidad convocante:** CECAM

**Ciudad entidad convocante:** Lyon, Francia

**Fecha de inicio-fin:** 11/02/2008 - 15/02/2008

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de entidad:** Centro de I+D





## Gestión de I+D+i

**Nombre de la actividad:** Dirección del Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling

**Tipología de la gestión:** Gestión de eventos organizados

**Funciones desempeñadas:** Director

**Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza

**Fecha de inicio:** 01/01/2015

**Duración:** 3 años

## Otros méritos

### Estancias en centros públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** Instituto Max-Planck para la Estructura y Dinámica de la Materia **Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación

**Ciudad entidad realización:** Hamburgo, Alemania

**Fecha de inicio-fin:** 05/01/2017 - 29/06/2017 **Duración:** 6 meses

**Entidad financiadora:** Ministerio de Economía y Competitividad

**Nombre del programa:** Salvador de Madariaga

**Objetivos de la estancia:** Invitado/a
- 2 Entidad de realización:** Donostia International Physics Center **Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación

**Ciudad entidad realización:** San Sebastián, País Vasco, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/06/2003 - 31/12/2003 **Duración:** 7 meses

**Nombre del programa:** Estancia FPU

**Objetivos de la estancia:** Doctorado/a
- 3 Entidad de realización:** Universidad de Zaragoza **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de inicio:** 01/10/2009 **Duración:** 5 meses

**Objetivos de la estancia:** Invitado/a

**Tareas contrastables:** Investigación
- 4 Entidad de realización:** University of Washington **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Seattle, Estados Unidos de América

**Fecha de inicio:** 01/07/2001 **Duración:** 4 meses

**Nombre del programa:** Estancia FPU

**Objetivos de la estancia:** Invitado/a

**Tareas contrastables:** Investigación
- 5 Entidad de realización:** Queen's University **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Kingston, Canadá

**Fecha de inicio:** 01/09/2000 **Duración:** 4 meses

**Nombre del programa:** Estancia FPU

**Objetivos de la estancia:** Invitado/a

**Tareas contrastables:** Investigación



## Sociedades científicas y asociaciones profesionales

**Nombre de la sociedad:** Real Sociedad Española de Física

**Ciudad entidad afiliación:** España

## Períodos de actividad investigadora, docente y de transferencia del conocimiento

**Entidad acreditante:** CNEAI

**Tipo de entidad:** Agencia Estatal

**Fecha de obtención:** 2012

## Resumen de otros méritos

- 1 Descripción del mérito:** Premio especial del jurado en el XIX Certamen Universitario "Arquímedes" (dirección de Trabajo de Fin de Grado)

**Entidad acreditante:** Ministerio de Universidades      **Tipo entidad:** Ministerio

**Fecha de concesión:** 2022
- 2 Descripción del mérito:** Miembro asociado y "beamline coordinator" de la European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF)

**Entidad acreditante:** European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF)

**Fecha de concesión:** 22/10/2010
- 3 Descripción del mérito:** Colaborador extraordinario del Departamento de Física Teórica de la Universidad de Zaragoza

**Entidad acreditante:** Universidad de Zaragoza      **Tipo entidad:** Universidad

**Ciudad entidad acreditante:** Zaragoza, Aragón, España

**Fecha de concesión:** 16/09/2010