



Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología

Curriculum vitae

Nombre: ELENA ARROYO Y DE DOMPABLO

Fecha: 1 de Abril de 2017

Apellidos: Arroyo y de Dompablo

Nombre: María Elena

Situación profesional actual

Organismo: Universidad Complutense de Madrid
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Ciencias Químicas
Depto./Secc./Unidad estr.: Departamento de Química Inorgánica
Dirección postal: Avda Complutense sn, 28040 Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-3945222

Fax:

Correo electrónico: e.arroyo@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2211, 2210, 33012

Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad

Fecha de inicio: 25 de Junio de 2010

Situación administrativa

☒ Plantilla

☐ Contratado

☐ Interino

☐ Becario

☐ Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo ☒

A tiempo parcial ☐

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Cálculos a partir de primeros principios, baterías de litio, materiales de intercalación

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
LICENCIADO EN CC. QUIMICAS	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	JUNIO 1993
LICENCIADO DE GRADO	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	SEPTIEMBRE 1994

Doctorado	Centro	Fecha
DOCTOR EN CC. QUIMICAS	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	JUNIO 1998

Actividades anteriores de carácter científico profesional

17-12-2007	25-6-2010	PROFESOR CONTRATADO DOCTOR	FACULTAD DE CC QUIMICAS, UCM
1-9-2005	17-12-2007	CONTRATADO RAMON Y CAJAL	FACULTAD DE CC QUIMICAS, UCM
21-11-2003	31-8-2005	CONTRATADO RAMON Y CAJAL	UNIVERSIDAD SAN PABLO-CEU
2-1-2003	20-11-2003	INVESTIGADOR TORRES QUEVEDO	CIDETEC
1-1-2000	31-12-2002	POSDOCTORAL ASSOCIATE	MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY
18-1-2001	1-10-2002	AYUDANTE DE FACULTAD	FACULTAD DE CC QUIMICAS, UCM
24-4-1998	17-1-2001	AYUDANTE DE ESCUELA UNIVERSITARIA	FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS
9-1997	23-4-1998	PROFESOR COLABORADOR	UNIVERSIDAD SAN PABLO - CEU
1-1994	12-1997	BECARIO PREDOCTORAL	FACULTAD DE CC QUIMICAS, UCM
9-1992	9-1993	BECARIO COLABORADOR	FACULTAD DE CC QUIMICAS, UCM

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
INGLÉS	C	C	C
ALEMÁN	R	R	R

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE I+D FINANCIADOS EN CONVOCATORIAS PÚBLICAS.

(nacionales y/o internacionales)

COMO INVESTIGADOR PRINCIPAL

5)

Título del proyecto: "Nuevos materiales para almacenamiento de energía. De la química computacional a las aplicaciones"

Referencia: MAT2007-62929

Entidad financiadora: MEC

Entidades participantes: UCM

Financiación concedida: 50.000 euros

Duración: 2007-2010

Investigador principal: M. E. Arroyo y de Dompablo

4)

Título del proyecto: "Estudio computacional y experimental de nuevos electrodos para baterías de litio obtenidos mediante alta presión / alta temperatura"

Referencia: PR01/07-14911

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: UCM

Financiación concedida: 6.000 euros

Duración: 2007

Investigador principal: M. E. Arroyo y de Dompablo

3)

Título del programa: ACCIÓN INTEGRADA HISPANO-FRANCESA

Referencia: HF-20060026

Entidad financiadora: MEC

Entidades participantes: **11.400 euros**

Duración: 2007- 2008

Investigador principal: M. E. Arroyo y de Dompablo y J.M. Tarascon

2)

Título del programa: RAMON Y CAJAL

Referencia: --

Entidad financiadora: MEC

Financiación concedida: 6.000 euros

Duración: 2003- 2007

Investigador principal: M. E. Arroyo y de Dompablo

1)

Título del proyecto: "Materiales inorgánicos como electrodo positivo para baterías de litio-ion"

Entidad financiadora: Gobierno Vasco

Entidades participantes: CIDETEC

Financiación concedida: 76.000 euros

Duración: 2003- 2005

Investigador Principal: Elena Arroyo y de Dompablo

COMO MIEMBRO DEL EQUIPO

19)	
Título del programa:	“CHALENG: RETOS EN MATERIALES INORGÁNICOS PARA APLICACIONES EN ENERGÍA”
Referencia:	MAT2014-53500-R
Entidad financiadora:	Ministerio de Economía y Competitividad
Entidades participantes:	UCMB, UCM
Financiación concedida:	170.000 euros
Duración:	2010-2015
Investigador principal:	M.R. Palacín
<hr/>	
18)	
Título del programa:	“HACIA UNA BATERIA ION-LI DE ESTADO SOLIDO: MATERIALES NANOESTRUCTURADOS OBTENIDOS POR VIA ELECTROQUIMICA”
Referencia:	MAT2011-22753
Entidad financiadora:	Ministerio de Ciencia e Innovación.
Entidades participantes:	UCO, UCM
Financiación concedida:	231.405 euros
Duración:	2010-2015
Investigador principal:	J.L. Tirado-Coello
<hr/>	
17)	
Título del programa:	“Química a Alta Presión”
Referencia:	S-2009/PPQ-1551
Entidad financiadora:	CAM
Entidades participantes:	UCM, CSIC (INTA, IF, ICMM).
Financiación concedida:	847.550,00 euros
Duración:	2010-2014
Investigador principal:	V. García Baonza
<hr/>	
16)	
Título del proyecto:	“Nuevos materiales obtenidos mediante alta presion / alta temperatura para dispositivos electroquímicos”
Referencia:	PR34/07-1854
Entidad financiadora:	UCM-Banco de Santander
Entidades participantes:	UCM
Financiación concedida:	10.000 euros
Duración:	2008-2009
Investigador principal:	E. Morán
<hr/>	
15)	
Título del programa:	“Materiales de alta presión”
Referencia:	CSD2007-00045
Entidad financiadora:	MEC
Entidades Participantes:	Universidad Jaime I de Castellón (UJI), Universidad Complutense de Madrid (UCM), Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), Universidad de La Laguna (ULL1), Centro de Astrobiología INTA-CSIC (CAB), Universidad de Oviedo (UOVI), Universidad de

	Cantabria (UCAN), Instituto del Frío CSIC (IF), Universidad de Valecia (UV)
Financiación concedida:	5.166.000 euros
Duración:	2007-2014
Investigador principal:	V. García Baonza

14)	
Título del programa:	"Materiales para la energía"
Referencia:	S-0505/PPQ-0093, Programa PAIDIR
Entidad financiadora:	CAM
Entidades participantes:	UCM, USP-CEU, UC3M, ICMM-CSIC.
Financiación concedida:	700.000 euros
Duración:	2005-2009
Investigador principal:	M. A. Alario y Franco

13)	
Título de la red:	"Chemistry of Materials under High Pressure"
Referencia:	COST
Entidad financiadora:	CEE
Entidades participantes:	UCM y 5 Universidades Europeas
Financiación concedida:	30.000 euros
Duración:	2003-2007
Investigador principal:	E. Morán (nodo UCM); G. Demazeau: coordinador europeo.

12)	
Título del proyecto:	"Red Temática de pilas de combustible y baterías avanzadas" (MAT2002-10814-E)
Entidad financiadora:	Ministerio de Ciencia y Tecnología.
Entidades participantes:	CSIC, y varias Universidades Españolas incluyendo a la UCM
Financiación concedida:	25.000 euros
Duración:	2003- 2004
Coordinador:	José Luis Acosta Luque (ICTP-CSIC)

11)	
Título del proyecto:	"Nuevos materiales para pilas de combustible y baterías de litio"
Referencia:	MAT 2004-03070-C05
Entidad financiadora:	Ministerio de Educación y Ciencia.
Entidades participantes:	Universidad San Pablo-CEU, Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (CSIC), Universidad Carlos III de Madrid, CIDETEC
Financiación Concedida:	87.000 euros (CO-05, UCM)
Duración:	2004- 2007
Coordinador:	Flaviano García Alvarado

10)	
Título del proyecto:	"Investigación de nuevos materiales y componentes para pilas de combustible"
Entidad financiadora:	Diputación Foral de Guipúzcoa
Entidades participantes:	CIDETEC, CEGASA, EPSA

Financiación concedida: **240.740,67 euros**
Duración: 2003-2005
Investigador responsable: Oscar Miguel Crespo

9)
Título del proyecto: "Preparación y estudio de propiedades de materiales superconductores en condiciones inusuales: altas presiones / altas temperaturas e intercalación"
Entidad financiadora: MCYT
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración: 2001- 2004
Investigador responsable: Miguel Angel Alario Franco

8)
Título del proyecto: "Science of Materials for Portable Power (Li₂NiO₂)"
Entidad financiadora: National Science Foundation/CMSE's MRSEC Program
Entidades participantes: Massachusetts Institute of Technology (DMSE), Center for Materials Science & Engineering (CMSE)
Duración: 2000- 2003
Financiación concedida: **400.000 USD**
Nº participantes: 2
Investigador responsable: Gerbrand Ceder

7)
Título del proyecto: "Advanced materials for micro- and nano-systems"
Entidad financiadora: NATIONAL UNIVERSITY OF SINGAPORE-MIT ALLIANCE
Entidades participantes: Massachusetts Institute of Technology, National University of Singapore
Duración: 2000- 2003
Financiación concedida: **500.000 USD**
Nº participantes: 3
Investigador responsable: Gerbrand Ceder

6)
Título del proyecto: "Materiales conductores iónicos para dispositivos electroquímicos de producción y almacenamiento de energía".
Entidad financiadora: CICYT (MAT 2001-3713-C04)
Entidades participantes: Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense, Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (CSIC), Universidad San Pablo CEU, Universidad Carlos III de Madrid.
Financiación concedida: **81.300 euros** (UCM)
Duración: 28/12/2001- 27/12/2004
Investigador responsable: Emilio Morán Miguélez

5)
Título del proyecto: "Materiales cerámicos superconductores. Preparación y estudio bajo alta presión y otras vías"
Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid (07N/ 0074/2001)
Entidades participantes: Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense

Duración: 01/01/2002 – 31/12/2002
Investigador responsable: Miguel Angel Alario Franco

4)
Título del proyecto: "Materiales cerámicos para baterías recargables y otros dispositivos"
Entidad financiadora: CICYT (MAT98-1053-C04-04)
Entidades participantes: Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense, Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (CSIC), Universidad San Pablo CEU, Universidad Carlos III de Madrid.

Duración: 1998- 2001
Investigador responsable: Flaviano García Alvarado

3)
Título del proyecto: Acción Integrada Hispano-Alemana 138-B
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Cultura
Entidades participantes: Technische Hochschule Darmstadt, Universidad Complutense de Madrid

Duración: 1996- 1997
Investigador responsable: Emilio Morán y Hartmut Fuess

2)
Título del proyecto: Acción Integrada Hispano-Alemana 141-B
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Cultura
Entidades participantes: Technische Hochschule Darmstadt, Universidad Complutense de Madrid

Duración: 1995-1996
Investigador responsable: Emilio Morán y Hartmut Fuess

1)
Título del proyecto: "Superconductores, conductores iónicos y pigmentos".
Entidad financiadora: CICYT (MAT 95-0809)
Entidades participantes: UCM
Duración: 01/07/1995-01/07/1998
Investigador responsable: Miguel Angel Alario Franco

**PARTICIPACION EN CONTRATOS DE INVESTIGACION DE ESPECIAL RELEVANCIA CON
EMPRESAS Y/O ADMINISTRACIONES**

TITULO DEL CONTRATO: Investigación computacional de nuevos materiales para baterías recargables
Contrato Art. 83-L.O.U.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Toyota Motor Europe
DURACIÓN DESDE: 1/6/2016 *HASTA:* 31/12/2016
INVESTIGADOR RESPONSABLE: M. E. Arroyo de Dompablo

TITULO DEL CONTRATO: Desarrollo de electrodos para baterías recargables.
Contrato Art. 83-L.O.U.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Toyota Motor Europe
DURACIÓN DESDE: 1/6/2015 *HASTA:* 1/09/2015
INVESTIGADOR RESPONSABLE: M. E. Arroyo de Dompablo

TITULO DEL CONTRATO: Desarrollo de electrodos para baterías recargables.
Contrato Art. 83-L.O.U.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Toyota Motor Europe
DURACIÓN DESDE: 1/11/2014 *HASTA:* 1/01/2015
INVESTIGADOR RESPONSABLE: M. E. Arroyo de Dompablo

TITULO DEL CONTRATO: Desarrollo de electrodos para baterías recargables.
Contrato Art. 83-L.O.U.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: Toyota Motor Europe
DURACIÓN DESDE: 1/10/2013 *HASTA:* 10/06/2014
INVESTIGADOR RESPONSABLE: M. E. Arroyo de Dompablo

TITULO DEL CONTRATO: Desarrollo de materiales para el almacenamiento de energía. Contrato Art. 83-L.O.U.

EMPRESA/ADMINISTRACIÓN FINANCIADORA: CIC-Energigune
DURACIÓN DESDE: 1/01/2012 *HASTA:* 01/07/2012
INVESTIGADOR RESPONSABLE: M. E. Arroyo de Dompablo

PUBLICACIONES O DOCUMENTOS CIENTÍFICO-TÉCNICOS

Se señala el autor responsable del trabajo

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

77)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, P. Tartaj, J.M. Amarilla and U. Amador

Título: Computational Investigation of Li Insertion in Li_3VO_4

Ref: Chemistry of Materials

Clave: Artículo Volumen: 28 (16), Páginas, inicial: 5643 final 5651 Fecha: 2016

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 9.2 Q1

76)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, C. Krich, J. Nava-Avendaño, M.R. Palacín and F. Bardé

Título: A joint computational and experimental evaluation of CaMn_2O_4 polymorphs as cathode materials for Ca ion batteries

Ref: Chemistry of Materials

Clave: Artículo Volumen: 28(19) Páginas, inicial: 6886 final 6893 Fecha: 2016

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 9.2 Q1

75)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, C. Krich, J. Nava-Avendaño, M.R. Palacín and F. Bardé

Título: In quest of cathode materials for Ca ion batteries: the CaMO_3 perovskites (M = Mo, Cr, Mn, Fe, Co, Ni)

Ref: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: Artículo Volumen: 18 Páginas, inicial: 19966 final 19972 Fecha: 2016

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 4.4 Q1

74)

Autores (p.o. de firma): A. Ponrouch, D. Tchitchekova, C. Frontera, F. Bardé, M.E. Arroyo-de Dompablo, and M.R. Palacín

Título: Assessing Si-based anodes for Ca-ion batteries: Electrochemical decalcification of CaSi_2

Ref: Electrochemistry Communications

Clave: Artículo Volumen: 66 Páginas, inicial: 75 final:78 Fecha: 2016

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 4.5 Q1

73)

Autores (p.o. de firma): Jessica Nava-Avendaño, M. Elena Arroyo-de Dompablo, Carlos Frontera, José A. Ayllón, M. Rosa Palacín

Título: Study of sodium manganese fluorides as positive electrodes for Na-ion batteries

Ref: Solid State Ionics

Clave: Artículo Volumen: 278 Páginas, inicial: 106 final: 113 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 2.5 ,Q2

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

72)

Autores (p.o. de firma): M. E. Arroyo-de Dompablo, M. A. Fernández-González and L. Fernández-Díaz

Título: Computational investigation of the influence of tetrahedral oxoanions (sulphate, selenate and chromate) on the stability of calcium carbonate polymorphs

Ref: RSC Advances

Clave: Artículo Volumen: 5 Páginas, inicial: 59845 final: 59852 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 3.6 ,Q1

71)

Autores (p.o. de firma): J. Nava-Avendaño, A. Morales-García, A. Ponrouch, G. Rousse, C. Frontera, P.

Senguttuvan, J.-M. Tarascon, M. E. Arroyo-de Dompablo and M. R. Palacín

Título: Taking steps forward in understanding the electrochemical behavior of Na₂Ti₃O₇

Ref: J. Materials Chemistry A

Clave: Artículo Volumen: 3 Páginas, inicial: 22280 final:22286 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 7.4,Q1

70)

Autores (p.o. de firma): A. Saracibar, Z. Wang, K. J. Carroll, Y. S. Meng, M. E. Arroyo-de Dompablo

Título: New insights into the electrochemical performance of Li₂MnSiO₄: effect of cationic substitutions

Ref: J. Materials Chemistry A

Clave: Artículo Volumen: 3 Páginas, inicial: 6004 final:06011 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto, 7.4,Q1

69)

Autores (p.o. de firma): A. Morales-García, M. Elena Arroyo-de Dompablo, A. G. Rousse, P. Senguttuvan, J.-M. Tarascon, M. Rosa Palacín

Título: Combining experiments and computations to understand the intercalation potential and redox mechanism for A₂Ti₃O₇ (A=Li, Na)

Ref: Materials Research Society symposia proceedings.

Clave: Artículo Volumen: 1 Páginas, inicial: 1740 final: 1745 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Materials Research Society DOI:10.1557/opl.2015.283

68)

Autores (p.o. de firma): Gregorio F. Ortiz, María C. López, M. Elena Arroyo de Dompablo, José L. Tirado

Título: Computational and experimental investigation of nalipoite-Li₂AP₂O₄ (A=Na, K) electrolytes for Li-ion batteries

Ref: Materials Research Society symposia proceedings.

Clave: Artículo Volumen: 1 Páginas, inicial: 1740 final: 1745 Fecha: 2015

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Materials Research Society DOI:10.1557/opl.2015.283

67)

Autores (p.o. de firma): E.M. Arroyo-de Dompablo

Título: "UNDERSTANDING SODIUM VERSUS LITHIUM INTERCALATION POTENTIALS OF ELECTRODE MATERIALS FOR ALKALI-ION BATTERIES"

Ref: Functional Materials Letters (Special Issue on Smart Energy Conversion and Storage 2014)

Clave: Artículo Volumen: 07 Páginas, inicial: 1440003-1 final: 1440003-4 Fecha: 2014

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1.622, Q2, por invitación de los editores

66)

Autores (p.o. de firma): M.C. Lopez, G. Ortiz, E.M. Arroyo-de Dompablo and J.L. Tirado

Título: "AN UNNOTICED INORGANIC SOLID ELECTROLYTE: DILITHIUM SODIUM PHOSPHATE WITH THE NALIPOITE STRUCTURE"

Ref: Inorganic Chemistry

Clave: Artículo Volumen: 53 Páginas, inicial: 2310 final: 2316 Fecha: 2014

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 10.23, Q1

65)

Autores (p.o. de firma): G Rouse, M. E. Arroyo-de Dompablo, P. Senguttuvan, A. Ponrouch, J.M. Tarascon, and M. R. Palacín

Título: "Rationalization of Intercalation Potential and Redox Mechanism for $A_2Ti_3O_7$ ($A = Li, Na$)"

Ref: Chemistry of materials

Clave: Artículo Volumen: 25 (24) Páginas, inicial: 4946 final: 4956 Fecha: 2013

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 8.23, Q1, nº citas 2

64)

Autores (p.o. de firma): P. Senguttuvan, G. Rouse, M. E. Arroyo y de Dompablo, Hervé Vezin, J.-M. Tarascon, and M. R. Palacín

Título: "Low-Potential Sodium Insertion in a NASICON-Type Structure through the Ti(III)/Ti(II) Redox Couple"

Ref: Journal of American Chemical Society

Clave: Artículo Volumen: 135(10) Páginas, inicial: 3897 final: 3903 Fecha: 2013

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 10.23, Q1 nº citas 18

63)

Autores (p.o. de firma): Y.S. Meng and M.E. Arroyo y de Dompablo.

Título: "RECENT ADVANCES IN FIRST PRINCIPLES COMPUTATIONAL RESEARCH OF CATHODE MATERIALS FOR LITHIUM BATTERIES."

Ref: Accounts of Chemical Research

Clave: Artículo Volumen: 46 (5) Páginas, inicial: 1171 final: 1180 Fecha: 2013

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto: 21.84. Q1 Por invitación de los editores. Nº citas 5

62)

Autores (p.o. de firma): Shadi Mirhashemihaghighi, Bernardo León, Carlos Pérez Vicente, José L. Tirado, Radostina Stoyanova, Meglena Yoncheva, Ekaterina Zhecheva, Regino Sáez Puche, Elena M. Arroyo, and Julio Romero de Paz

Título: "LITHIUM STORAGE MECHANISMS AND EFFECT OF PARTIAL COBALT SUBSTITUTION IN MANGANESE CARBONATE ELECTRODES"

Ref: Inorganic Chemistry

Clave: Volumen: 51(10) Páginas, inicial: 5554 final: 5560 Fecha: 2012

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 4.59, Q1 nº citas 10

61)

Autores (p.o. de firma): D. Santamaría-Pérez, U. Amador, J. Tortajada, R. Dominko, and M. E. Arroyo- de Dompablo

Título: "HIGH-PRESSURE INVESTIGATION OF $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ AND $\text{Li}_2\text{CoSiO}_4$ ELECTRODE MATERIALS FOR LITHIUM-ION BATTERIES"

Ref: Inorganic Chemistry

Clave: Volumen: 51(10) Páginas, inicial: 5779 final: 5786 Fecha: 2012

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.59, Q1 nº citas 8

60)

Autores (p.o. de firma): R. Baddour-Hadjean, M. Smirnov, K. Smirnov, Y. Kazimirov, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador, M.E. Arroyo-de Dompablo, J.P. Pereira-Ramos

Título: "LATTICE DYNAMICS of $\beta\text{-V}_2\text{O}_5$: RAMAN SPECTROSCOPIC INSIGHT INTO ATOMISTIC STRUCTURE OF A HIGH PRESSURE VANADIUM PENTOXIDE POLYMORPH"

Ref: Inorganic Chemistry

Clave: Volumen: 51(5) Páginas, inicial: 3194 final: 3201 Fecha: 2012

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.59, Q1 nº citas 6

59)

Autores (p.o. de firma): A. Saracibar, A. Van der Ven and M.E. Arroyo-de Dompablo

Título: "CRYSTAL STRUCTURE, ENERGETICS AND ELECTROCHEMISTRY OF $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ POLYMORPHS FROM FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS"

Ref: Chemistry of Materials

Clave: Volumen: 24(3) Páginas, inicial: 495 final: 503 Fecha: 2012

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 8.23 Q1 nº citas 27

58)

Autores (p.o. de firma): C. R. Fell, D. H. Lee, Y. S. Meng, J.M. Gallardo-Amores, E. Morán and M.E. Arroyo-de Dompablo

Título: "HIGH PRESSURE DRIVEN STRUCTURAL AND ELECTROCHEMICAL MODIFICATIONS IN LAYERED LITHIUM TRANSITION METAL INTERCALATION OXIDES"

Ref: Energy and Environmental Science

Clave: Volumen: 5(3) Páginas, inicial: 6214 final: 6224 Fecha: 2012

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto: 11.65 Q1 nº citas 8

57)

Autores (p.o. de firma): M. Armand, J-M. Tarascon and M.E. Arroyo y de Dompablo.

Título: "COMPARATIVE COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF N AND F SUBSTITUTED POLYOXOANIONIC COMPOUNDS: THE CASE OF $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ ELECTRODE MATERIAL."

Ref: Electrochemistry Communications

Clave: A Volumen 13 Páginas, inicial: 1047 final: 1050 Fecha: 2011

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 4.42 Q1 nº citas 10

56)

Autores (p.o. de firma): M. Armand and M.E. Arroyo y de Dompablo.

Título: "BENEFITS OF N SUBSTITUTION FOR O IN POLYOXIANIONIC COMPOUNDS. A COMPUTATIONAL INVESTIGATION OF $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ "

Ref: Journal of Materials Chemistry,

Clave: A Volumen 21(27) Páginas, inicial: 10026 final: 10034 Fecha:

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 6.10 Q1 Incluido por invitación en "Advanced Materials for Lithium Batteries" special issue 2011. Seleccionado como "hot article" por los editores., nº citas 14

55)

Autores (p.o. de firma): Elena Arroyo y de Dompablo, Ulises Amador, Esther Lozano, Carsten Baehtz, Emilio Morán, and Antonio Fernandez Fuentes.

Título: "REACTIVITY OF NANO-LaPO₄ COMPOSITES IN LITHIUM CELLS: ROLE OF THE PARTICLE SIZE"

Ref: ECS transactions, Rechargeable Lithium and Lithium Ion Batteries

Clave: CL Volumen 33(29) Páginas, inicial: 101 final: 110 Fecha: 2011

54)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, A. Morales, M. Taravillo

Título: "DFT+U CALCULATIONS ON THE CRYSTAL LATTICE, ELECTRONIC STRUCTURE AND PHASE STABILITY UNDER PRESSURE OF TiO₂ POLYMORPHS"

Ref: J. Chem. Phys.

Clave:A Volumen 135 Páginas, inicial: 054503 final: 054511 Fecha: 2011

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 3.16. Q1 n° citas 21

53)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, D. Santamaría Pérez and K. Persson

Título: "POLYMORPHS BY PRESSURE"

Clave: Capítulo de libro

Referencia: Título: "High Pressure Processes In Chemical Engineering"

Editorial: ProcessEng Engineering GmbH, 2010

Editor: Maximilian Lackner MBA, Institute of Chemical Engineering, Vienna University of Technology

52)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, N. Biskup, J.M. Gallardo-Amores, E. Morán, H. Ehrenberg, and U. Amador

Título: "GAINING INSIGHTS INTO THE ENERGETICS OF FePO₄ POLYMORPHS"

Ref: Chemistry of Materials

Clave: A Volumen 22(3) Páginas, inicial: 994 final: 1001 Fecha: 2010

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 8,23 Q1, Incluido por invitación en "Materials Chemistry of Energy Conversion" special issue 2010. n° citas 6

51)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, Yueh-Lin Lee and D. Morgan

Título: "FIRST PRINCIPLES INVESTIGATION OF OXYGEN VACANCIES IN COLUMBITE MNb₂O₆ (M=Mn, Fe, Co, Ni, Cu)"

Ref: Chemistry of Materials

Clave: A Volumen: 22(3) Páginas, inicial: 906 final: 913 Fecha: 2010

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Incluido por invitación en "Materials Chemistry of Energy Conversion" special issue 2010. Índice de Impacto; 8.23 Q1. N° citas 3

50)

Autores (p.o. de firma): Y.S. Meng and M.E. Arroyo y de Dompablo,

Título: "FIRST PRINCIPLES COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN FOR ENERGY STORAGE MATERIALS IN LITHIUM ION BATTERIES" (Review)

Ref.: Energy and Environmental Science

Clave: R Volumen: 2 Páginas, inicial: 589 final: 609 Fecha: 2009

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Por invitación. "Top ten" Julio-Septiembre 2009, 448 entradas en el mes de Julio. Índice de impacto 11.65 Q1. N° citas 69

49)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador, E. Morán, H. Ehrenberg, L. Dupont and R. Dominko

Título: "POLYMORPHS OF Li_2MSiO_4 (M = Mn, Co). THE ROLE OF PRESSURE"

Ref. J. Power Sources

Clave: A Volumen: 189 Páginas, inicial: 638 final: 642 Fecha: 2009

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.91 Q1. N° citas 14

48)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, R. Dominko, J.M. Galalrdo-Amores, M. Bali, L. Dupont, H. Ehrenberg, E. Moran and J. Jamnik

Título: "ON THE ENERGETIC STABILITY AND ELECTROCHEMISTRY OF $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ POLYMORPHS"

Ref. Chemistry of Materials.

Clave: A Volumen: 20 (17) Páginas, inicial: 5574 final: 5584 Fecha: 2008

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto; 8.23 Q1. 84 citas

47)

Autores (p.o. de firma): U. Amador, J.M. Gallardo-Amores, G. Heymann, H. Huppertz, E. Morán and M.E. Arroyo-de Dompablo

Título: "HIGH PRESSURE POLYMORPHS OF LiCoPO_4 AND LiCoAsO_4 "

Ref. Solid State Sciences

Clave: A Volumen: 11 (2) Páginas, inicial: 343 final: 348 Fecha: 2009

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto: 1.74 Q2. N° citas 9

46)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo and E. Morán

Título: "A COMPARATIVE STUDY OF GaAsO_4 POLYMORPHS: "AB INITIO" CALCULATIONS ON HIGH-PRESSURE FORMS"

Ref. Z. Naturforsch. B

Clave: A Volumen: 63b Páginas, inicial: 668 final: 672 Fecha: 2008

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto: 0.89 Q4

45)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, J. García-Martínez, E. Morán, J-M. Tarascon and M. Armand

Título: "IS IT POSSIBLE TO PREPARE OLIVINE - LiFeSiO_4 ?. A JOINT COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL INVESTIGATION"

Ref. Solid State Ionics

Clave: A Volumen: 179 Páginas, inicial: 1758 final: 1762 año: 2008

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.04 Q2, n° citas 8

44)

Autores (p.o. de firma): J.M. Gallardo-Amores, N. Biskup, U. Amador, K. Persson, G. Ceder, E. Morán and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: "COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE V_2O_5 TRANSFORMATION UNDER PRESSURE"

Ref. Chemistry of Materials,

Clave: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 5262 final: 5271 Fecha: 2007

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 8.23 Q1, n° citas: 17

43)

Autores (p.o. de firma): M. E. Arroyo-de Dompablo, U. Amador, J.M. Gallardo-Amores, C. Baehtz, N. Biskup and E. Morán

Título: "HIGH PRESSURE MATERIALS FOR ENERGY STORAGE. THE CASE OF V_2O_5 "

Ref. Journal of Physics: Conference Series,

Clave: A Volumen: 121 Páginas, inicial: 032001 final: Fecha: 2008

42)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, P. Rozier, M. Morcrette and J.M. Tarascon

Título: "ELECTROCHEMICAL DATA TRANSFERABILITY WITHIN $Li_{Y+1}VOXO_4$ ($X = Si, Ge_{0.5}Si_{0.5}, Ge, Si_{0.5}As_{0.5}, Si_{0.5}P_{0.5}, As, P$) POLYOXYANIONIC COMPOUNDS"

Ref. Chemistry of Materials

Clave: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 2411 final: 2422 Fecha: 2007

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 8.23 Q1, nº citas 3

41)

Autores (p.o. de firma): A. Kuhn, P. Díaz-Carrasco, M.E. Arroyo y de Dompablo and F. García-Alvarado

Título: "ON THE SYNTHESIS OF RAMSDELLITE $LiTiMO_4$ ($M = Ti, V, Cr, Mn$ AND Fe): AN EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY OF THE SPINEL-RAMSDELLITE TRANSFORMATION"

Ref. European Journal of Inorganic Chemistry,

Clave: A Volumen: 21 Páginas, inicial: 3375 final: 3384 Fecha: 2007

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 3.12 Q1 nº citas 9

40)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador and E. Morán

Título: "ARE HIGH PRESSURE MATERIALS SUITABLE FOR ELECTROCHEMICAL APPLICATIONS?. HP- V_2O_5 AS A NOVEL ELECTRODE MATERIAL FOR Li BATTERIES"

Ref. Electrochemistry. Communications.,

Clave: A Volumen: 9/6 Páginas, inicial: 1305 final: 1310 Fecha: 2007

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.42 Q1, nº citas 5

39)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, U. Amador and J.M. Tarascon

Título: "A COMPUTATIONAL STUDY OF FLUORINATED-POLYOXYANIONIC COMPOUNDS AS CATHODE FOR Li BATTERIES"

Ref.: J. Power Sources

Clave: A Volumen: 174 (2) Páginas, inicial: 1251 final: 1257 Fecha: 2007

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.90 Q1, nº citas 15

38)

Autores (p.o. de firma): N. Biškup, J.L. Martínez, P. Díaz-Carrasco, M.E. Arroyo y de Dompablo, and J. Morales

Título: "RELATION BETWEEN THE MAGNETIC PROPERTIES AND THE CRYSTAL AND ELECTRONIC STRUCTURES OF MANGANESE SPINELS $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$ and $LiCu_{0.5}Mn_{1.5}O_{4-\delta}$ ($0 < \delta < 0.125$)"

Ref. J. Applied Physics

Clave: A Volumen: 100 Páginas, inicial: 093908-1 final: 093908-6 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.21 Q2, nº citas 12

37)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo and J. Morales

Título: "A FIRST-PRINCIPLES INVESTIGATION OF THE ROLE PLAYED BY OXYGEN DEFICIENCY IN THE ELECTROCHEMISTRY PROPERTIES OF $\text{LiCu}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_{4-\delta}$ SPINELS"

Ref. J. Electrochemical Society

Clave: A Volumen: 153 Páginas, inicial: A2098 final: A2102 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2,58, Q1 n° citas 3

36)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, M. Armand, J.M. Tarascon and U. Amador

Título: "ON-DEMAND DESIGN OF POLYOXIANIONIC CATHODE MATERIALS BASED ON ELECTRONEGATIVITY CORRELATIONS. AN EXPLORATION OF THE Li_2MSiO_4 SYSTEM (M = Fe, Mn, Co, Ni)"

Ref. Electrochemistry Communications

Clave: A Volumen: 8 Páginas, inicial: 1292 final: 1298 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.42, Q1. "**Top-ten**" Julio-septiembre 2006. 123 citas

35)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, M. T. Azcondo, F. García-Alvarado and U. Amador

Título: "TOWARDS INNOVATIVE ELECTRODE MATERIALS OBTAINED BY HIGH-PRESSURE : EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY OF HP-FePO_4 "

Ref. J. Phys Chem. Solids

Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 1243 final: 1247 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1,4, Q2, n° citas:3

34)

Autores (p.o. de firma): M. E. Arroyo-de Dompablo and U. Amador

Título: "A COMPUTATIONAL INVESTIGATION ON THE ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF SPINEL-LIKE LiCoAsO_4 AS CATHODE FOR LITHIUM BATTERIES "

Ref. Solid State Science

Clave: A Volumen: 8 Páginas, inicial: 916 final: 921 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1.72 Q2, n° citas 2

33)

Autores (p.o. de firma): M. E. Arroyo-de Dompablo, U. Amador, M. Alvarez, J.M. Gallardo and F. García-Alvarado

Título: "NOVEL OLIVINE AND SPINEL LiMAsO_4 (M = 3D-METAL) AS POSITIVE ELECTRODE MATERIALS IN LITHIUM CELLS "

Ref. Solid State Ionics

Clave: A Volumen: 177 Páginas, inicial: 2625 final: 2628 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.04 Q2, n° citas 11

32)

Autores (p.o. de firma): M.E. Rabanal, M.C. Gutierrez, F. García-Alvarado, E. Gonzalo and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: "IMPROVED ELECTRODE CHARACTERISTICS OF OLIVINE- LiCoPO_4 BY HIGH ENERGY MILLING PROCESS"

Ref.: J. Power Sources

Clave: A Volumen: 160 Páginas, inicial: 523 final: 528 Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.90. Q1, n° citas 51

31)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, U. Amador and F. García-Alvarado
Título: "AN EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY OF THE ELECTRODE MATERIAL OLIVINE-
 LiCoAsO_4 "

Ref. J. Electrochem. Soc.

Clave: A Volumen: 153 (4) Páginas, inicial: A673 final: A678

Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES : Índice de Impacto 2.58 Q1, nº citas 10

30)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, M. Alvarez-Vega, C. Baehtz and U. Amador

Título: "STRUCTURAL EVOLUTION OF $\text{Li}_{3+x}\text{Fe}(\text{MoO}_4)_3$ UPON LITHIUM INSERTION IN THE
COMPOSITIONAL RANGE $0 \leq x \leq 1$ ".

Ref. J. Electrochem. Soc.

Clave: A Volumen: 153 Páginas, inicial: A275 final: A280

Fecha: 2006

ASPECTOS MÁS RELEVANTES : Índice de Impacto 2.51 Q1, nº citas 2

29)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo-de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores and U. Amador

Título: "LITHIUM INSERTION IN THE HIGH PRESSURE POLYMORPH OF FePO_4 : COMPUTATIONAL
PREDICTIONS AND EXPERIMENTAL FINDINGS"

Ref. Electrochem. Solid State Lett.

Clave: A Volumen: 8 (11) Páginas, inicial: A564 final: A569 Fecha: 2005

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.00, Q2. nº citas 2.

28)

Autores (p.o. de firma): U. Amador, C. Baehtz, P. Diaz, A. Orera, A. Kuhn, M. Alvarez-Vega and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: "Structural characterization of the inserted compounds $\text{Li}_{3+x}\text{Fe}(\text{MoO}_4)_3$ ($x=0$ and $x=1$)

Ref. : Hamburger Synchrotronstrahlungslabor Report

Clave: S Volumen: Páginas, inicial: final:

Fecha: 2005

27)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, C. Baehtz, P. Diaz-Carrasco, J.M. Gallardo-Amores and U. Amador

Título: Structural characterization of HP-FePO_4 and the lithium-inserted compound Li_xFePO_4 ($x \sim 0.2$)

Ref. Hamburger Synchrotronstrahlungslabor Report

Clave: S Volumen: Páginas, inicial: final:

Fecha: 2005

26)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo and G. Ceder

Título: "A FIRST PRINCIPLES STUDY OF HYDROGEN STORAGE IN NaAlH_4 - RELATED COMPLEX
HYDRIDES "

Ref. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie

Clave: A Volumen: 631 Páginas, inicial: 1982 final: 1984 Fecha: 2005

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1,10

25)

Autores (p.o. de firma): M. Alvarez-Vega, U. Amador and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: "ELECTROCHEMICAL STUDY OF $\text{Li}_3\text{Fe}(\text{MoO}_4)_3$ AS POSITIVE ELECTRODE IN LITHIUM CELLS "

Ref.: Journal of the Electrochemical Society

Clave: A Volumen: 152(7) Páginas, inicial: 1306 final: 1311

Fecha: 2005

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2,44 Q1, nº citas 10

24)

Autores: M.E. Rabanal, M.E. Arroyo y de Dompablo, M.C. Gutierrez, A. Khalifa, F. García-Alvarado, JM. Torralba

Título: "INFLUENCE OF HIGH ENERGY MECHANICAL GRINDING IN OLIVINE LiCoPO_4 "

Ref : European Powder Metallurgy Association, ISBN 1899072-18-7

Clave: S Páginas, inicial: 469 final:474 Año: 2005

23)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo and G. Ceder

Título: "FIRST PRINCIPLES INVESTIGATIONS OF COMPLEX HYDRIDES AMH_4 AND A_3MH_6 (A=Li, Na, K, M=B, Al, Ga) AS HYDROGEN STORAGE SYSTEMS "

Ref. J. Alloys and Comp.

Clave: A Volumen:364 Páginas, inicial: 6 final: 12 Fecha: 2004

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2,72, Q1. nº citas 40

22)

Autores (p.o. de firma): K. Kang, D. Carlier, J. Reed, M.E. Arroyo, G. Ceder, L. Croguennec and C. Delmas

Título: "SYNTHESIS AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF LAYERED $\text{Li}_{0.9}\text{Ni}_{0.45}\text{Ti}_{0.55}\text{O}_2$ "

Ref.: Chemistry of Materials

Clave: A Volumen: 15 Páginas, inicial: 4503 final: 4507 Fecha: 2003

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 5.04. Q1, nº citas 26.

21)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo and G. Ceder

Título: "FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS ON Li_xNiO_2 : PHASE STABILITY AND MONOCLINIC DISTORTION"

Ref. : J. Power Sources

Clave: A Volumen: 5374 Páginas, inicial: 1 final: 4 Fecha: 2003

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 3.47. Q1, nº citas 16.

20)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo and G. Ceder

Título: "ON THE ORIGIN OF THE MONOCLINIC DISTORTION IN Li_xNiO_2 "

Ref.: Chemistry of Materials

Clave: A Volumen: 15 Páginas, inicial: 63 final: 67 Fecha: 2003

ASPECTOS MÁS RELEVANTES : Índice de Impacto 5.04 Q1, nº citas 6

19)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, A. Van der Ven and G. Ceder

Título: "FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF LITHIUM ORDERING AND PHASE STABILITY ON Li_xNiO_2 ",

Ref. : Physical Review B

Clave: A Volumen: 66 Páginas, inicial: 64112-1 final:64112-9 Fecha: 2002

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 3,32. Q1, nº citas 33.

18)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, J. García , A. Várez and F. García-Alvarado

Título: "ELECTRODE CHARACTERISTICS OF $\text{Li}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ -RAMSDELLITE PROCESSED BY MECHANICAL GRINDING"

Ref. : Journal of Materials Science

Clave: A Volumen: 37 Páginas, inicial: 3981 final: 3986

Fecha: 2002

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2,35, Q1, nº citas 1

17)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, C. Marianetti, A. Van der Ven and G. Ceder

Título: , "JAHN-TELLER MEDIATED ORDERING IN LAYERED Li_xMO_2 COMPOUNDS"

Ref.: Physical Review. B

Clave: A Volumen: 63 Páginas, inicial: 144107-1 final: 144107-9 Fecha: 2001

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 3,76, Q1, nº citas 19.

16)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, C. Marianetti, A. Van der Ven and G. Ceder,

Título: "CATIONIC ORDERING IN LAYERED Li_xNiO_2 COMPOUNDS: FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS"

Ref. : Proc. Electrochem. Soc.

Clave: S Volumen: 2000-21 Páginas, inicial: 494 final: 498 Fecha: 2000

15)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, A. Várez and F. García-Alvarado

Título: "STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF ELECTROCHEMICALLY OBTAINED $\text{Li}_{2+x}\text{Ti}_3\text{O}_7$ ($0 < x \leq 2.24$) PHASES"

Ref. : J. Solid State Chem.,

Clave: A Volumen: 153 Páginas, inicial: 132 final: 139 Fecha: 2000

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1,91. Q2, nº citas 15.

14)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, M.A. Alario, F. Drymiotis, A.D. Bianchi and Z. Fisk

Título: "NOVEL SUPERCONDUCTORS PRODUCED BY ELECTROCHEMICAL ZINC INSERTION IN $\beta\text{-ZrNCl}$ AND RELATED COMPOUNDS"

Ref.: Int. J. Inorganic Materials

Clave: A Volumen: 2 Páginas, inicial: 581 final: 588 Fecha: 2000

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1,72 Q2, nº citas 7

13)

Autores (p.o. de firma): C. Rial, M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, M.A. Alario-Franco, U. Amador, H. Ehrenberg and H. Fuess

Título: "SYNCHROTRON X-RAY DIFFRACTION STUDY OF PHASE SEPARATION ON HEATING OXIDIZED $\text{La}_2\text{CuO}_{4.103(4)}$: THE STABILIZATION OF PHASE $\text{La}_2\text{CuO}_{4.086(4)}$ "

Ref.: Physica C

Clave: A Volumen: 319 Páginas, inicial: 21 final: 33 Fecha: 1999

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 0.74, Q3, nº citas 3

12)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, F. García Alvarado

Título: "FROM $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ TO $\text{Li}_{28}\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ BY ELECTROCHEMICAL LITHIUM INSERTION; VERSATILE APPLICATION IN LITHIUM BATTERIES"

Ref.: Int. J. Inorganic Materials

Clave: A Volumen: 1 Páginas, inicial: 83 final: 86 Fecha: 1999

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 1,72 Q2, nº citas 3

11)
Autores (p.o. de firma): F. García-Alvarado, M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, MT Gutiérrez, A. Kuhn and A. Várez
Título: " NEW ELECTRODE MATERIALS FOR LITHIUM RECHARGEABLE BATTERIES "
Ref.: J. Power Sources
Clave: A Volumen: 81-82 Páginas, inicial: 85 final: 89 Fecha: 1999
ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 3.47. Q1, nº citas 13.

10)
Autores (p.o. de firma): M.E. Rabanal, A. Várez, U. Amador, M.E. Arroyo y de Dompablo and F. García-Alvarado
Título; "STRUCTURE AND REACTION WITH LITHIUM OF TETRAGONAL PYROCHLORE-LIKE COMPOUND $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ "
Ref: Journal of Materials Processing Technology
Clave: A Volumen: 92-93 Páginas, inicial: 529 final: 533 Fecha: 1999
ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2,04, Q1, nº citas 2

9)
Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado, E. Morán, C. Prieto and H. Fuess
Título: "LITHIUM INSERTION IN $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$: STUDY OF THE $\text{Li}_x\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ ($0 < x < 12$) PHASES "
Ref.: Molecular Crystals and Liquid Crystals
Clave: A Volumen: 311 Páginas, inicial: 31 final: 36 Fecha: 1998
ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 0,54, Q4, nº citas 2

8)
Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, A. Várez y F. García-Alvarado
Título: "SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL COMPUESTO DE INTERCALACIÓN $\text{Li}_{2+x}\text{Ti}_3\text{O}_7$ "
Ref.: Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio
Clave: A Volumen: 41 Páginas, inicial: 910 final: 914 Fecha: 1998
ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 0,7, Q4

7)
Autores (p.o. de firma): Título: L. Mesonero, M.E. Arroyo y de Dompablo, M.J. Ruiz Aragón and E. Morán
Título; "ELECTROCHEMICAL SODIUM INSERTION / DEINSERTION IN $\text{Na}_2(\text{MoOPO}_4)_2(\text{HPO}_4) \cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($y=2,0$)"
Ref.: Journal of Materials Chemistry
Clave: A Volumen: 8(11) Páginas, inicial: 2405 final: 2410 Fecha: 1998
ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 4.65, Q1

6)
Autores (p.o. de firma): M.E. Rabanal, A. Várez, U. Amador, M.E. Arroyo y de Dompablo and F. García-Alvarado
Título; "STRUCTURE AND REACTION WITH LITHIUM OF TETRAGONAL PYROCHLORE-LIKE COMPOUND $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ "
Ref.: Proc. Advances in Materials and Processing Technologies
Clave: A Volumen: Páginas, inicial: 962 final: 963 Fecha: 1997

5)
Autores (p.o. de firma): M. Eugenia Rabanal, Alejandro Várez, Ulises Amador, M. Elena Arroyo y de Dompablo, y F. García-Alvarado
Título: "ESTRUCTURA Y REACCIÓN CON LITIO DEL PIROCLORO TETRAGONAL $\text{Sm}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ "
Ref.: Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio
Clave: A Volumen: 36 Páginas, inicial: 141 final: 145 Fecha: 1997

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 0,7, Q4

4)

Autores (p.o. de firma): M. E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, A. Várez and F. García-Alvarado

Título: "ELECTROCHEMICAL LITHIUM INTERCALATION IN $\text{Li}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ - RAMSDELLITE STRUCTURE"

Ref. Materials Research Bulletin

Clave: A Volumen: 32 Páginas, inicial: 993 final: 1001 Fecha: 1997

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.14. Q2, 2nº citas 24.

3)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado and E. Morán

Título: " $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ AND RELATED COMPOUNDS AS POSITIVE ELECTRODE MATERIALS FOR LITHIUM RECHARGEABLE BATTERIES"

Ref.: Solid State Ionics

Clave: A Volumen: 91 Páginas, inicial: 273 final: 278 Fecha: 1996

ASPECTOS MÁS RELEVANTES: Índice de Impacto 2.43 Q2. nº citas 12.

2)

Autores (p.o. de firma): M.E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado, E. Morán, C. Prieto and H. Fuess

Título: "AN X-RAY ABSORPTION STUDY ON $\text{Li}_x\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ COMPOUNDS"

Ref.: Hamburger Synchrotronstrahlungslabor Report.

Clave: S Volumen: 1 Páginas, inicial: 836 final: 837 Fecha: 1996

1)

Autores (p.o. de firma): C. Rial, M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, M.A. Alario-Franco, U. Amador, S. Doyle and H. Fuess

Título: "SYNCHROTRON X-RAY DIFFRACTION STUDY OF PHASE SEPARATION IN $\text{La}_2\text{CuO}_{4.103(4)}$ PREPARED BY ROOM TEMPERATURE CHEMICAL OXIDATION"

Ref., Hamburger Synchrotronstrahlungslabor Report.

Clave: S Volumen: 1 Páginas, inicial: 596 final: 597 Fecha: 1996

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS

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

Centro: UNIVERSITY OF CALIFORNIA SAN DIEGO
Localidad: SAN DIEGO País: EEUU Fecha: 29/5/16-16/6/16 Duración (semanas): 3
Tema: Lithium mobility in spinel compounds
Clave: Invitado

Centro: UNIVERSITY OF CALIFORNIA SAN DIEGO
Localidad: SAN DIEGO País: EEUU Fecha: 05/7/11-06/8/11 Duración (semanas): 4
Tema: High pressure driven modifications in lithium layered oxides materials
Clave: Invitado

Centro: UNIVERSITE DE PICARDIE JULES VERNE
Localidad: AMIENS País: FRANCIA Fecha: 22/2/09-26/2/09 Duración (semanas): 1
Tema: Compuestos de V como electrodo para baterías de ion-litio.
Clave: Invitado (proyecto HF2006-0026)

Centro: UNIVERSITE DE PICARDIE JULES VERNE
Localidad: AMIENS País: FRANCIA Fecha: 7/7/08-25/7/08 Duración (semanas): 3
Tema: Estudio de materiales para almacenamiento de hidrógeno.
Clave: Invitado (proyecto HF2006-0026)

Centro: UNIVERSITE DE PICARDIE JULES VERNE
Localidad: AMIENS País: FRANCIA Fecha: 22/7/07-26/7/07 Duración (semanas): 1
Tema: Silicatos como electrodo para baterías de ion-litio.
Clave: Invitado (proyecto HF2006-0026)

Centro: MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY
Localidad: BOSTON País: USA Fecha: 13/7/06 -4/8/06 Duración(semanas):3
Tema: Aplicación de los cálculos *ab initio* al estudio de materiales obtenidos mediante alta presión
Clave: Invitado (Bolsa de viaje UCM)

Centro: MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY
Localidad: BOSTON País: USA Fecha: 1/10/00-31/12/02 Duración(semanas):119
Tema: Cálculos *ab initio* en materiales para pilas de combustible y baterías de litio
Clave: Contratado

Centro: MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY
Localidad: BOSTON País: USA Fecha: 1/1/00- 30/9/00 Duración (semanas): 37
Tema: Investigación a partir de primeros principios en compuestos de intercalación
Clave: Becario postdoctoral (UCM)

Centro: NATIONAL HIGH MAGNETIC FIELD LABORATORY
Localidad: TALLAHASSEE País: USA Fecha: 14/7/99- 14/9/99 Duración (semanas): 13
Tema: Caracterización microestructural de hexaboruros
Clave: Invitado (Bolsa de viaje UCM)

Centro: UNIVERSITE DE PICARDIE JULES VERNE			
Localidad: AMIENS	País: FRANCIA	Fecha: 16/4/97- 22/4/97	Duración (semanas): 1
Tema: Difraccion de rayos-X "in situ" en materiales de intercalación			
Clave: Doctorado			
Centro: TECHNISCHE HOCHSHULE DARMSTADT			
Localidad: DARMSTADT	País: ALEMANIA	Fecha: 1/7/96– 31/8/96	Duración (semanas): 8
Tema: Caracterización de óxidos mediante radiación sincrotrón			
Clave: Doctorado			
Centro: TECHNISCHE HOCHSHULE DARMSTADT			
Localidad: DARMSTADT	País: ALEMANIA	Fecha: 15/9/95-4/11/95	Duración (semanas): 6
Tema: Estudio de óxidos ternarios como nuevos electrodos para baterías			
Clave: Doctorado			

CONTRIBUCIONES A CONGRESOS

CONFERENCIAS INVITADAS

7)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: High Pressure driven structural and electrochemical modifications of cathode materials for Li-ion batteries

Congreso: Ceramics for Energy Workshop

Lugar celebración: San Diego, US

Fecha: 3-4 June 2016

6)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: Recent Density Functional Theory Investigation in Electrode Materials for rechargeable batteries

Congreso: 229th Electrochemical Society Meeting

Lugar celebración: San Diego, US

Fecha: 30 mayo-2 June 2016

5)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: Density Functional Theory Investigation of Electrode Materials for alkali-ion batteries

Congreso: 14th Ulm Electrochemical Talks

Lugar celebración: Ulm, Alemania

Fecha: 24-26 June 2014

4)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: First principles calculations as a tool for understanding redox reaction mechanisms of electrode materials for Na batteries

Congreso: 1st Symposium on Na batteries

Lugar celebración: Vitoria, España

Fecha: 16-18 Octubre 2013

3)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: First Principles Computational Research of Energy Storage Materials

Congreso: 7th French-Spanish workshop on Chemistry and Physics on Solid State

Lugar celebración: Paris, Francia

Fecha: 13-15 Junio 2012

2)

Autores: Y. S. Meng and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: Recent Advances in First Principles Computational Research of Cathode Materials for Rechargeable Batteries

Congreso: 2012 MRS Spring Meeting

Lugar celebración: San Francisco, USA

Fecha: 9-13 Abril 2012

1)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo and U. Amador

Título: High Pressure Materials as Electrodes for Lithium Batteries: a Computational and Experimental Approach

Congreso: 23rd European Crystallographic Meeting

PARTICIPACIONES ORALES

Se señala el autor ponente

29)

Autores: M.E. Arroyo-de Dompablo, J.M. Gallarado-Amores, U. Amador and E. Morán

Título: "High pressure materials as electrode for Li ion batteries"

Congreso: AIRAPT-25th & EHPRG-53rd International Conference on High Pressure Science and Technology

Lugar celebración: Madrid

Fecha: 30 Agosto- 4 Septiembre 2015

28)

Autores: A. Morales-García, M. E. Arroyo-de Dompablo, G. Rousse, P. Senguttuvan, J.M. Tarascon, M.R. Palacín

Título: "Combining Experiments and Computations to Understand the Intercalation Potential and Redox Mechanism for $A_2Ti_3O_7$ ($A=Li, Na$)"

Congreso: MRS Fall Meeting

Lugar celebración: Boston (US)

Fecha: 1-5 Diciembre 2014

27)

Autores: P. Senguttuvan, G. Rousse, J.-M. Tarascon, M. R. Palacín and M.E. Arroyo de Dompablo

Título: All titanium based electrodes for sodium-ion batteries

Congreso: 223th ECS Meeting

Lugar celebración: Toronto (Canada)

Fecha: 12-16 Mayo 2013

26)

Autores: P. Senguttuvan, G. Rousse, M.E. Arroyo de Dompablo, J.-M. Tarascon and M. R. Palacín

Título: $A_2Ti_3O_7$ ($A = Li, Na$) anodes for Na-ion batteries

Congreso: 2013th MRS Spring Meeting and Exhibit

Lugar celebración: San Francisco (USA)

Fecha: 1-5 Abril 2013

25)

Autores: M.E. Arroyo de Dompablo

Título: Materiales de alta presión como electrodo para baterías de litio

Congreso: I Simposio Español de Altas Presiones

Lugar celebración: Miraflores de la Sierra, Madrid

Fecha: 23-27 Enero 2011

24)

Autores: Christopher Fell, J.M. Gallardo-Amores, M.E. Arroyo y de Dompablo, Ying Shirley Meng

Título: High pressure driven structural and electrochemical modifications in layered Lithium transition metal intercalation oxides

Congreso: 219th ECS Meeting

Lugar celebración: Boston (U.S.A.)

Fecha: Octubre 2011

23)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo,

Título: High Pressure Driven-Phase Transitions of Li-Based Electrode Materials Guided by First Principles Calculations

Congreso: 218th ECS Meeting

Lugar celebración: Las Vegas (U.S.A.)

Fecha: 10-15 Octubre 2010

22)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador, N. Biskup and E. Morán

Título: High-pressure synthesis and driven-phase transitions of Li-based electrode materials.

Congreso: IX reunión nacional de electrocerámica

Lugar celebración: Madrid

Fecha: 28-30 Junio 2009

21)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador, P. Rozier, L. Dupont, J-M. Tarascon, and E. Morán

Título: High-pressure vanadium compounds as electrode for Li batteries.

Congreso: Sixth International Conference on Inorganic Materials

Lugar celebración: Dresden, Alemania

Fecha: 28-30 Septiembre 2008

20)

Autores: E. Morán, J.M. Gallardo-Amores, C. Baethz, N. Biskup, U. Amador and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: The high pressure polymorph of V_2O_5 as a novel electrode for lithium batteries

Congreso: 16th Solid State Ionics

Lugar celebración: Shanghai, China

Fecha: 1-6 Julio 2007

19)

Autores: D. Santamaría-Pérez, A. Vegas, J.Haines, U. Amador, J. M. Gallardo, E. Arroyo, E. Morán

Título: Un nuevo polimorfo de arseniato de galio: síntesis bajo alta presión y cálculos *ab initio*.

Congreso: QIES

Lugar celebración: Barcelona, España

Fecha: 10-14 Septiembre 2006

18)

Autores: A. Kuhn, P. Díaz-Carrasco, M.E. Arroyo y de Dompablo and F. García-Alvarado

Título: On the spinel –Ramsdellite transformation of $LiTiMO_4$ (M=Ti, V, Cr, Mn and Fe)

Congreso: QIES

Lugar celebración: Barcelona, España

Fecha: 10-14 Septiembre 2006

17)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, M. Morcrette and J-M. Tarascon

Título: Deepening into the Relation of Li Intercalation Voltages to the X Electronegativity in Polyoxyanionic Li_xVOXO_4 Compounds (X = Ge, Si, As, P)",

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

16)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, M. Alvarez-Vega, F. García-Alvarado, U. Amador and A. Várez

Título: Experimental and DFT study of the electrochemical behaviour of $LiCoXO_4$ (X = P, As).

Congreso: International Conference on Solid State Ionics

Lugar celebración: Baden-Baden, Alemania

Fecha: 17 -22 Julio 2005

15)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, P. Diaz-Carrasco, N. Biškup y J. Morales

Título: Propiedades electroquímicas y magnéticas de espinelas $\text{LiM}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$, (M = Ni, Cu): estudio computacional de la estructura cristalina y electrónica

Congreso: Electrocerámica 2005, VII Reunión Nacional

Lugar celebración: Teruel, España

Fecha: 30 Junio-1 julio 2005

14)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, F. García-Alvarado and U. Amador

Título: Towards innovative electrode materials: the high-pressure polymorphs of quartz- FePO_4 and olivine- LiCoAsO_4

Congreso: 13th Internacional Symposium on Intercalation Compounds

Lugar celebración: Clermont-Ferrand, Francia

Fecha: 6 -9 Junio 2005

13)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo and G. Ceder

Título: A first principles study of Hydrogen storage in complex metal hydrides

Congreso: 11 Reunión Científica plenaria de Química Inorgánica, 5 Reunión Científica plenaria de Química del estado sólido y I Spanisch-Deutsches Wissenschaftliches Kolloquium von Arbeitsgruppen für Anorganische Chemie

Lugar celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha: 12 -16 febrero 2004

12)

Autores: K. Kang, D. Carlier, J. Reed, E.M. Arroyo and G. Ceder.

Título: Synthesis, electrochemical properties and first principles study of layered $\text{Li}_{0.9}\text{Ni}_{0.45}\text{Ti}_{0.55}\text{O}_2$ compound.

Congreso: 2003 Li battery discussion

Lugar celebración: Arcachon, FRANCIA

Fecha: 15-19 septiembre 2003

11)

Autores: E. Arroyo and G. Ceder.

Título: Computational study of lithium insertion in Li_xNiO_2 .

Congreso: 2003 Li battery discussion

Lugar celebración: Arcachon, FRANCIA

Fecha: 15-19 septiembre 2003

10)

Autores: E. Arroyo and G. Ceder.

Título: First principles investigations of the thermodynamics of complex metal hydrides

Congreso: 203rd Meeting of the Electrochemical Society

Lugar celebración: Paris, FRANCIA

Fecha: 27 abril-2 mayo, 2003

9)

Autores: G. Ceder, D. Carlier, J. Reed, E. Arroyo and J. Gorman.

Título: Structure, Stability and charge/discharge behaviour of $\text{Li}(\text{Ni},\text{Mn})\text{O}_2$

Congreso: 203rd Meeting of the Electrochemical Society

Lugar celebración: Paris, FRANCIA

Fecha: 27 abril-2 mayo, 2003

8)

Autores: H. Simthson, D. Morgan, C. Marianetti, A. Predith, A. Van Der Ven, E. Arroyo, S. Curtarolo and G. Ceder.

Título: Understanding the limits of hydrogen storage in metals.

Congreso: Materials Research Society Spring Meeting 2002

Lugar celebración: San Francisco, USA

Fecha: 1-5 abril, 2002

7)

Autores: Meng Ying, Li Yi, E. M. Arroyo and G. Ceder

Título: Amorphous metallic glass as new high power and energy density anodes for lithium ion rechargeables batteries

Congreso: Singapore –MIT Alliance Annual Symposium

Lugar celebración: Singapore, Singapore.

Fecha: 14-16 enero, 2002

6)

Autores: E. Arroyo, A. Van Der Ven, C. Marianetti and G. Ceder

Título: First principles investigations on lithium insertion in LiNiO_2

Congreso: The American Ceramic Society 103rd Annual Meeting

Lugar celebración: Indianápolis, USA

Fecha: 22-25 abril, 2001

5)

Autores: M. E. Arroyo y de Dompablo, C. Marianetti, A. Van der Ven and G. Ceder

Título: First principles investigations in Li_xNiO_2

Congreso: The 198th Meeting of the Electrochemical Society

Lugar celebración: Phoenix, USA

Fecha: 22-27 octubre, 2000

4)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, M.A. Alario Franco, F. Drymiotis, A. Bianchi and Z. Fisk.

Título: Novel superconductors synthesized by electrochemical Zn intercalation in ZrNiCl and related compounds

Congreso: Materials Research Society Fall meeting 99

Lugar celebración: Boston, USA

Fecha: 23 noviembre-3 diciembre 1999

3)

Autores: F. García-Alvarado, E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, A. Várez, M.T. Gutiérrez y A. Kuhn

Título: "The quest for new electrode materials: a journey to nowhere?"

Congreso: 9th International Meeting on Lithium Batteries

Lugar de celebración: Edimburgo, Reino Unido

Fecha: 12-17 julio, 1998

2)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, A. Várez, F. García-Alvarado y E. Morán

Título: Synthesis and electrochemical characterization of the phases $\text{Li}_{2+x}\text{Ti}_3\text{O}_7$

Congreso: International Materials Research Conference Cancun'96

Lugar de celebración: Cancún, Méjico

Fecha: 1- 5 septiembre 1996

1)

Autores: E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado y E. Morán

Título: $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ and Related Compounds as Positive Electrode Materials for Lithium Rechargeable Batteries

Congreso: 10th International Conference on Solid State Ionics

Lugar de celebración: Singapur

Fecha: 3 - 8 diciembre 1995

COMUNICACIONES PÓSTER

40)

Autores: J. Nava-Avendaño, A. Morales-García, A. Ponrouch, G. Rousse, C. Frontera, P. Senguttuvan, J.-M. Tarascon, M. E. Arroyo-de Dompablo, M. Rosa Palacín

Título: "Towards understanding the electrochemical behavior of $\text{Na}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ "

Congreso: 8th International Conference on Advanced Lithium Batteries for Automobile Applications

Lugar celebración: Bilbao

Fecha: 30 Septiembre- 2 Octubre 2015

39)

Autores: A. Saracibar, Z. Wang, K. Carroll, Y. S. Meng and M.E. Arroyo-de Dompablo

Título: "A joint computational and experimental investigation of $\text{Li}_2\text{yMn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{SiO}_4$ electrode materials for lithium ion batteries"

Congreso: 8th International Conference on Advanced Lithium Batteries for Automobile Applications

Lugar celebración: Bilbao

Fecha: 30 Septiembre- 2 Octubre 2015

38)

Autores: M.E. Arroyo de Dompablo and J. Sánchez-Benítez

Título: "Ab initio investigation of $\text{RCu}_3(\text{Mn}_3\text{A})\text{O}_{12}$ (R = Ca, Nd, A = Mn, Fe) complex perovskites"

Congreso: AIRAPT-25th & EHPRG-53rd International Conference on High Pressure Science and Technology

Lugar celebración: Madrid

Fecha: 30 Agosto- 4 Septiembre 2015

37)

Autores: G. F. Ortiz, M C. López, M.E. Arroyo-de Dompablo and José L. Tirado

Título: "Investigation of $\text{Li}_3\text{-xNa}_x\text{PO}_4$ solid electrolytes for alkali-ion batteries: lithium diffusion in Nalipoite Li_2NaPO_4 "

Congreso: MRS Fall Meeting

Lugar celebración: Boston (US)

Fecha: 1-5 Diciembre 2014

36)

Autores: María C. López, Gregorio F. Ortiz, Elena M. Arroyo-de Dompablo and José L. Tirado

Título: Experimental and Computational Investigation of $\text{Li}_3\text{-xNa}_x\text{PO}_4$ solid electrolytes for alkali-ion batteries

Congreso: 14th Ulm Electrochemical Talks

Lugar celebración: Ulm, Alemania

Fecha: 24-26 June 2014

35)

Autores: C. Braun, N. Kiziltas Yavuz, K. Nikolowski, J.M. Gallardo-Amores,

M.E. Arroyo-de Dompablo, H. Ehrenberg

Título: High-pressure polymorphs of spinel-type LiMn_2O_4 as cathode materials for lithium-ion batteries

Congreso: DGK 2013 - 21st Annual Conference of the German Crystallographic Society

Lugar celebración: Freiberg (Alemania)

Fecha: 19-23 Marzo 2013

34)

Autores: J. Tortajada, D. Santamaría-Pérez, U. Amador and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: High-Pressure investigation of $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ and $\text{Li}_2\text{CoSiO}_4$ electrode materials for Lithium batteries.

Congreso: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Lugar celebración: Barcelona

Fecha: 26-29 Junio 2012

33)

Autores: A. Saracibar , A. Van der Ven and M. E. Arroyo-de Dompablo

Título: Crystal Structure, Energetics and electrochemistry of $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ polymorphs from First Principles calculations

Congreso: Power our future 2012. The 1st International Forum on Progress and Trends in Battery and Capacitor Technologies

Lugar celebración: Vitoria (España)

Fecha: 19-21 Marzo 2012

32)

Autores: C. Braun, N. K. Yavuz, E. Reitz, K. Nikolowski, J. M. Gallardo-Amores, M. E. Arroyo-de Dompablo H. Ehrenberg

Título: High-Pressure Investigations of spinel-type LiTM_2O_4 (TM = transition metal) cathode materials

Congreso: 20th Annual Meeting of the German Crystallographic Society

Lugar celebración: Munich (Alemania)

Fecha: 12-15 Marzo 2012

31)

Autores: M. Armand and E. Arroyo y de Dompablo

Título: Introducing $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4\text{-yNy}$ ($y = 0, 0.5, 1$) nitrido-silicates as positive electrode materials for lithium batteries

Congreso: International Conference on Solid State Ionics

Lugar celebración: Varsovia (Poland)

Fecha: 3-8 July 2011

30)

Autores: M. Armand and E. Arroyo y de Dompablo,

Título: Nitro-silicates as positive electrode materials for lithium batteries. A first principles investigation of $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4\text{-yNy}$ ($y = 0, 0.5, 1$)

Congreso: Lithium Battery Discussion

Lugar celebración: Arcachon (Francia)

Fecha: 12-17 Junio 2011

29)

Autores: E. Arroyo y de Dompablo, U. Amador, E. Lozano, C. Baehtz, E. Morán, and A. Fernandez Fuentes

Título: Reactivity of Nano- LaPO_4 Composites in Lithium Cells: Role of the Particle Size

Congreso: 218th ECS Meeting

Lugar celebración: Las Vegas (U.S.A.)

Fecha: 10-15 Octubre 2010

28)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, U. Amador, N.Biskup and E. Morán

Título: Thermodynamic stability and electrochemical behaviour of high pressure FePO_4 polymorphs

Congreso: Seventh International Conference on Inorganic Materials

Lugar celebración: Biarritz (Francia)

Fecha: 12-14 Septiembre 2010

27)

Autores: A. Morales-García, M. Taravillo, and M. E. Arroyo y de Dompablo

Título: A DFT + U investigation on the high pressure forms of TiO and TiOF

Congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Lugar celebración: Oviedo

Fecha: 29 Junio- 2 Julio 2010

26)

Autores: C. Frayret and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: First principles investigation of Li_2MSiO_4 polymorphs.

Congreso: Sixth International Conference on Inorganic Materials

Lugar celebración: Dresden, Alemania

Fecha: 28-30 Septiembre 2008

25)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, R. Dominko, J.M. Gallardo-Amores, G. Mali, L. Dupont, H. Ehrenberg, E. Moran, and J. Jamnik

Título: Polymorphs of $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$. The role of pressure.

Congreso: The 14th International Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Tianjin, China

Fecha: 22-28 Junio 2008

24)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, J-M. Tarascon, M. Armand, and E. Morán

Título: A joint computational and experimental investigation towards the preparation of olivine- LiMSiO_4 ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Mn}$).

Congreso: 5º Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido

Lugar celebración: Clermont-Ferrand

Fecha: Abril 2008

23)

Autores: E. Morán, U. Amador, J.M. Gallardo-Amores and M.E. Arroyo-de Dompablo

Título: High pressure materials for energy storage

Congreso: 21st AIRAPT and 45th EHPRG Int. Conference, Sicilia, Septiembre 2007

Lugar celebración: Catania, Sicilia

Fecha: Septiembre 2007

22)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, J.M. Gallardo-Amores, E. Morán, J-M. Tarascon and M. Armand

Título: Targeting to olivine- LiMSiO_4 ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Mn}$). A question of pressure?

Congreso: 16th Solid State Ionics

Lugar celebración: Shanghai, China

Fecha: 1-6 Julio 2007

21)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, U. Amador and J. Tarascon

Título: Computational Investigation of Fluorinated-polyoxyanionic Compounds as Cathode Materials for Lithium Batteries

Congreso: 23rd European Crystallographic Meeting

Lugar celebración: Lovaina, Bélgica

Fecha: 7-11 Agosto 2006

20)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, P. Diaz-Carrasco, N. Biskup and J. Morales

Título: Role of the Oxygen Deficiency in the Electrochemistry of $\text{LiCu}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_{4-x}$ Spinel

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

19)

Autores: U. Amador, M. E. Arroyo y de Dompablo and M. Alvarez-Vega

Título: Electrochemical and Structural Characterization of $\text{Li}_{3+x}\text{Fe}(\text{MoO}_4)_3$ Upon Lithium Insertion

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

18)

Autores: U. Amador, J. Gallardo- Amores, F. Garcia-Alvarado and M. E. Arroyo y de Dompablo

Título: Electrochemistry of Olivine and Spinel LiCoAsO_4 Towards Lithium

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

17)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, U. Amador and J. Tarascon

Título: Thoughts on Fluorinated-polyoxyanionic Compounds as Cathode Materials for Lithium Batteries

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

16)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, M. Rabanal, M. Gutierrez and F. Garcia-Alvarado

Título: Influence of High Energy Milling Process on the Electrochemical Performance of LiCoPO_4

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

15)

Autores: M. E. Arroyo y de Dompablo, J. Gallardo Amores and U. Amador

Título: Lithium Intercalation in High Pressure- FePO_4

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

14)

Autores: E. Moran, U. Amador, J. Gallardo-Amores and M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: On the way to Spinel LiMPO_4

Congreso: Internacional Meeting on Lithium Batteries

Lugar celebración: Biarritz, Francia

Fecha: 18-23 Junio 2006

13)

Autores: M.E. Rabanal M.C. Gutierrez, F. García-Alvarado, JM. Torralba, M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: "Electrochemical Properties of LiCoPO_4 after mechanical grinding process"

Congreso: Euro PM 2005 Congress & Exhibition

Lugar celebración: Praga (República Checa)

Fecha: 2-5 octubre 2005

12)

Autores: M.E. Rabanal, MC. Gutiérrez, F. García-Alvarado y M.E. Arroyo y de Dompablo

Título: Effect of mechanical grinding process on the electrode characteristics of olivine- LiCoPO_4

Congreso: The 10th European Conference on Solid State Chemistry

Lugar celebración: Sheffield (Reino Unido)

Fecha: Septiembre 2005

11)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, F. García-Alvarado

Título: Espectroscopia de absorción de rayos-X aplicada a materiales para baterías de litio

Congreso: Reunión Nacional de Usuarios Radiación Sincrotrón

Lugar celebración: Málaga, España

Fecha: 5 -6 febrero 2004

10)

Autores: E. Arroyo and G. Ceder.

Título: *Ab initio* calculations on phase stability of Li_xNiO_2 .

Congreso: 11th international meeting on lithium batteries

Lugar celebración: Monterey, USA

Fecha: 23-28 junio, 2002

9)

Autores: A. Várez, J. García, J. Franco Lineros, A. Kuhn, F. García-Alvarado y E. Arroyo y de Dompablo

Título: Optimización de las prestaciones como electrodo en baterías de litio de diversos materiales procesados por molienda mecánica.

Congreso: Vth European Conference on Solid State Chemistry

Lugar celebración: Madrid, España

Fecha: 15-18 septiembre, 1999

8)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, M.J. Saavedra, M.J. Ruiz Aragón and C. Parada

Título: Electrochemical lithium insertion in double chromates $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{II}}(\text{CrO}_4)_2$ ($\text{M}^{\text{I}}=\text{Na, K, Rb}$; $\text{M}^{\text{II}}=\text{Cr, Ga}$)

Congreso: Vth European Conference on Solid State Chemistry

Lugar celebración: Madrid, España

Fecha: 15-18 septiembre, 1999

7)

Autores: C. Rial, E. Arroyo, M.A. Alario Franco, E. Morán, H. Ehrenberg, H. Fuess and U. Amador

Título: Study of phase separation on heating oxidised $\text{La}_2\text{CuO}_{4.103(4)}$ by synchrotron X-Ray diffraction

Congreso: Vth European Conference on Solid State Chemistry

Lugar celebración: Madrid, España

Fecha: 15-18 septiembre, 1999

6)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, M.A. Alario Franco, F. Drymiotis, A. Bianchi and Z. Fisk.

Título: Superconductivity in the new intercalation compound Zn_xZrNCl ($x=0.04$)

Congreso: Vth European Conference on Solid State Chemistry

Lugar celebración: Madrid, España

Fecha: 15-18 septiembre, 1999

5)

Autores: A. Várez, J. García, J. Franco Lineros, A. Jun, F. García-Alvarado y E. Arroyo y de Dompablo

Título: Optimización de las prestaciones como electrodo en baterías de litio de diversos materiales procesados por molienda mecánica.

Congreso: VI Reunión Nacional de Materiales

Lugar celebración: San Sebastián, España

Fecha: 1999

4)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán y F. García-Alvarado

Título: "From $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ to $\text{Li}_{28}\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ by electrochemical insertion: versatile applications in lithium batteries"

Congreso: 1st International Conference on Inorganic Materials

Lugar de celebración: Versailles, Francia

Fecha: 16-19 septiembre 1998

3)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, E. Morán, A. Várez y F. García-Alvarado

Título: Obtención de nuevas fases $\text{Li}_{2+x}\text{Ti}_3\text{O}_7$ mediante intercalación electroquímica

Congreso: III Reunión Nacional de Electrocerámica

Lugar de celebración: Alcalá de Henares, España

Fecha: 19-20 junio 1997

2)

Autores: M.E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado, E. Morán, C. Prieto y H. Fuess

Título: X-ray absorption study of lithium insertion in $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$

Congreso: 9th International Symposium on Intercalation Compounds

Lugar de celebración: Arcachon, Francia

Fecha: 25 - 29 mayo 1997

1)

Autores: E. Arroyo y de Dompablo, F. García-Alvarado y E. Morán

Título: $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ and Related Compounds as Positive Electrode Materials for Lithium Rechargeable Batteries

Congreso: Vth European Conference on Solid State Chemistry

Lugar de celebración: Montpellier, Francia

Fecha: 4 – 7 septiembre 1995

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

CONFERENCIAS, CURSOS Y SEMINARIOS IMPARTIDOS

9)

Seminario: "DISEÑO DE MATERIALES PARA LA ENERGÍA A PARTIR DE CÁLCULOS AB INITIO"
Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC
14 Abril de 2011.

8)

Conferencia: "HIGH PRESSURE MATERIALS FOR ENERGY STORAGE",
Institut for Complex Materials, IFW-Dresden, Dresden.
1 de Octubre, 2008.

7)

Seminario: "APLICACIÓN DE MÉTODOS DE CÁLCULO AB INITIO AL ESTUDIO DE MATERIALES", Seminarios de fronteras de la ciencia de materiales,
Departamento de ciencia de materiales, Universidad Politécnica de Madrid,
E. T. S. de Ingenieros de Caminos. 14 Enero de 2008.

6)

Conferencia: "HIGH PRESSURE MATERIALS FOR ENERGY STORAGE",
Université de Picardie Jules Verne, Amiens.
27 Julio, 2007

5)

Curso: Escuela de verano "COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND Li-ION BATTERIES" organizada por la Red Europea de Excelencia ALISTORE (Advanced Lithium Energy Storage Systems, NOE), National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia
Del 16 de Julio al 20 de Julio de 2007.

4)

Conferencia: "HIGH PRESSURE MATERIALS FOR ENERGY STORAGE"
Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, Reunión COST.
30 Mayo, 2007.

3)

Conferencia, "APLICACION DE CALCULOS AB INITIO AL ESTUDIO DE NUEVOS MATERIALES PARA BATERIAS DE LITIO"
Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería, Universidad de Córdoba
3 de Marzo 2006.

2)

Seminario: "APPLICATION OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO THE STUDY OF LITHIUM BATTERY MATERIALS"
UMR-CNRS 6007, Université de Picardie Jules Verne, Amiens.
4 - 5 Septiembre 2005.

1)

Curso: "TECNICAS ELECTROQUIMICAS PARA EL ESTUDIO DE SOLIDOS" dentro del Curso MATERIALES AVANZADOS , Escuela Politécnica Superior de la Universidad Carlos III de Madrid.
6 julio-30 septiembre 1998

TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN DIRIGIDOS

12) TITULO: "Estudio computacional de silicatos como electrodo para baterías de litio" (Estancia Postdoctoral.)

DOCTOR/A: Amaia Saracibar

Trabajo de investigación de la estancia postdoctoral desde febrero 2010 hasta enero 2011

Publicaciones Derivadas:

A. Saracibar, A. Van der Ven and M.E. Arroyo-de Dompablo, "CRYSTAL STRUCTURE, ENERGETICS AND ELECTROCHEMISTRY OF $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ POLYMORPHS FROM FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS", Chemistry of Materials, 2012. Índice de Impacto; 6.2

11) TITULO: "Estudio computacional de modificaciones estructurales y composicionales de TiO_2 " (Trabajo de investigación del D.E.A.)

DOCTORANDO/A: Angel Morales

UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid

CURSO: 2009-2010

FACULTAD/ESCUELA: Cc. Químicas

CALIFICACIÓN: Sobresaliente

Publicaciones Derivadas:

M.E. Arroyo y de Dompablo, A. Morales, M. Taravillo, "HYBRID DENSITY FUNCTIONAL THEORY AND DFT+U CALCULATIONS ON THE CRYSTAL LATTICE, ELECTRONIC STRUCTURE AND PHASE STABILITY UNDER PRESSURE OF TiO_2 POLYMORPHS", J. Chem. Phys, 2011.

Presentación poster en congresos internacional (ESPA 2010)

10) TITULO: "Efecto del tamaño de partícula en las propiedades electroquímicas de V_2O_5 " (asignatura proyecto)

DOCTORANDO/A: Elena Juberías

UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid

CURSO: 2009-2010

FACULTAD/ESCUELA: Cc. Físicas, Ingeniería de Materiales

CALIFICACIÓN: Notable

9) TITULO: "Nuevos materiales como electrodo para baterías de litio. Efectos del procesado: de la escala micro a la escala nano" (asignatura proyecto)

DOCTORANDO/A: Esther Lozano Cortés

UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid

CURSO: 2006-2007

FACULTAD/ESCUELA: Cc. Físicas, Ingeniería de Materiales

CALIFICACIÓN: Sobresaliente

Publicaciones derivadas:

Elena Arroyo y de Dompablo, Ulises Amador, Esther Lozano, Carsten Baehtz, Emilio Morán, and Antonio Fernandez Fuentes., "REACTIVITY OF NANO- LaPO_4 COMPOSITES IN LITHIUM CELLS: ROLE OF THE PARTICLE SIZE", ECS transactions, Rechargeable Lithium and Lithium Ion Batteries, Aceptado

Presentación poster en congreso internacional (218th ECS Meeting, 2010)

8) *TITULO*: “Estudio Computacional de transiciones de fase bajo alta presión en óxidos MO (M = Cu, Pd)”.
(asignatura proyecto)

DOCTORANDO/A: Juan Carlos Chicote (alumno de la ONCE)

UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid *FACULTAD/ESCUELA*: Cc. Físicas, Ingeniería de Materiales

CURSO: 2006-2007

CALIFICACION: Notable

7) *TITULO*: ‘Estudio Computacional de Nuevos Materiales $\text{LiTi}_{2-x}\text{M}_x\text{O}_4$: Estructura Cristalina y Propiedades Electroquímicas’ (Trabajo de investigación del D.E.A.)

DOCTORANDO/A: Pilar Díaz Carrasco

UNIVERSIDAD: Universidad Carlos III de Madrid

FACULTAD/ESCUELA: Programa de Doctorado en
Ciencia e Ingeniería de Materiales).

CURSO: 2004- 2006

CALIFICACION: Sobresaliente

Publicaciones Derivadas:

A.Kuhn, P. Díaz-Carrasco, M.E. Arroyo y de Dompablo and F. García-Alvarado, “ON THE SYNTHESIS OF RAMSDELLITE LiTiMO_4 (M = Ti, V, Cr, Mn AND Fe): AN EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY OF THE SPINEL-RAMSDELLITE TRANSFORMATION” European Journal of Inorganic Chemistry, 2007. Índice de Impacto 2,5

N. Biškup, J.L. Martínez, P. Díaz-Carrasco, M.E. Arroyo y de Dompablo, and J. Morales “RELATION BETWEEN THE MAGNETIC PROPERTIES AND THE CRYSTAL AND ELECTRONIC STRUCTURES OF MANGANESE SPINELS $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ and $\text{LiCu}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_{4-\delta}$ ($0 < \delta < 0.125$)”, J. Applied Physics, 100, 093908-1 - 093908-6, 2006. Índice de Impacto 2,5

Presentación oral en congresos nacionales (QUIES 2006 y Electrocerámica 2005)

6) *TITULO*: “Optimización de LiCoPO_4 mediante molienda mecánica, como electrodo positivo de baterías recargables de litio”. (Trabajo fin de carrera)

DOCTORANDO/A: M. Carmen Gutiérrez Samaniego

UNIVERSIDAD: Carlos III de Madrid

FACULTAD/ESCUELA: Ingeniería de Materiales

CURSO: 2004-2006

CALIFICACION: Matrícula de honor

Publicaciones derivadas:

M.E. Rabanal, M.C. Gutierrez, F. García-Alvarado, E. Gonzalo and M.E. Arroyo y de Dompablo, “IMPROVED ELECTRODE CHARACTERISTICS OF OLIVINE- LiCoPO_4 BY HIGH ENERGY MILLING PROCESS”, J. Power Sources, 160, 523- 528, 2006. Índice de Impacto 2,8

M.E. Rabanal, M.E. Arroyo y de Dompablo, M.C. Gutierrez, A. Khalifa, F. García-Alvarado, JM. Torralba “Influence of High Energy Mechanical Grinding in Olivine LiCoPO_4 ”, European Powder Metallurgy Association, 469-474, 2005.

Presentación póster en congreso nacional (Electrocerámica 2005) e internacional (IMLB 2006)

2-5) *TITULO*: “Nuevos materiales con estructura tipo olivino como electrodo para baterías de litio” (asignatura trabajo fin de licenciatura, 4º químicas). Codirección de cuatro trabajos sobre esta temática.

UNIVERSIDAD: San Pablo-CEU

FACULTAD/ESCUELA: Facultad de Farmacia

CURSO: 2003-2004

1) **TITULO:** "Optimización de un nuevo electrodo para su uso en baterías recargables de litio" (trabajo fin de carrera)

DOCTORANDO/A: Ramón Jesus García Padilla

UNIVERSIDAD: Carlos III de Madrid

CURSO: 1999- 2000

FACULTAD/ESCUELA: Ingeniería de Materiales

CALIFICACION: *Matricula de honor*

Publicaciones derivadas:

M.E. Arroyo y de Dompablo, J. García , A. Várez and F. García-Alvarado, "ELECTRODE CHARACTERISTICS OF $\text{Li}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ -RAMSDELLITE PROCESSED BY MECHANICAL GRINDING", Journal of Materials Science, 37, 3981- 3986, 2002. Índice de Impacto 0,9

Presentación poster en congreso nacional (VI Reunión Nacional de Materiales, 1999) e internacional (Vth European Conference on Solid State Chemistry 1999)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

PERTENENCIA A SOCIEDADES CIENTÍFICAS

- Real Sociedad Española de Química (España)
- Electrochemical Society (USA)
- Red Nacional de Pilas de Combustible (España)
- Asociación Usuarios Sincrotrón de España, AUSE (España)

PARTICIPACIÓN EN TRIBUNALES DE TESIS DOCTORALES

- Tesis doctoral: "efectos electroquímicos en el dopado con líquidos iónicos: el caso del cuprato superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ " "".
Doctorando: Ana María Pérez Muñoz
Fecha: 9 de Febrero de 2016, Universidad: Universidad Complutense de Madrid
Figura: secretaria del tribunal
- Tesis doctoral: "Nuevos materiales híbridos para electrodo negativo en baterías de ion litio basados en compuestos de estaño o titanio modificados con carbono o poliacrilonitrilo".
Doctorando: Francisco José Nacimiento Cobos
Fecha: 13 de Diciembre de 2013, Universidad: Universidad de Córdoba
Figura: vocal del tribunal
- Tesis doctoral: "Development of nanoparticulate forms of tin-based alloy materials for high energy density anodes in lithium-ion batteries"".
Doctorando: Uche Godswill Nwokeke
Fecha: 4 de Mayo de 2012, Universidad: Universidad de Córdoba
Figura: secretaria del tribunal
- Tesis doctoral: "Síntesis y caracterización de óxidos nanoestructurados de Gadolinio e ytrio dopados con europio obtenidos mediante el método de spray-pirólisis".
Doctorando: Luz Stella de las Mercedes Gómez
Fecha: 18 de diciembre de 2008, Universidad: Carlos III de Madrid
Figura: secretaria del tribunal
- Tesis doctoral: "Estudios de la influencia del proceso de molienda de alta energía en derivados carbonosos: propiedades, optimización y aplicaciones".
Doctorando: Susana Guzmán Fernández
Fecha: 11 de julio de 2008, Universidad: Carlos III de Madrid
Figura: suplente del tribunal

PARTICIPACIÓN EN TRIBUNALES DE PRUEBAS DE ACCESO A LA UNIVERSIDAD

- Universidad: Universidad Complutense de Madrid
Centro: Facultad de Derecho, SEDE 21
Convocatoria: ordinaria junio 2013
Figura: Vocal (Química)

REVISOR DE PUBLICACIONES CIENTÍFICAS INTERNACIONALES

(se indica el índice de impacto de la revista, y la posición de la revista en los listados de los campos correspondientes)

Nature Materials (29.89, Q1); NPG Asia Materials (10.11; Q1); Energy and Environmental Science (9.44, Q1); Journal of the American Chemical Society (8.09, Q1), Chemistry of Materials (5.04, Q1), Electrochemistry Communications (4.41 Q1), Journal of Solid State Chemistry (2.2; Q2), J. Materials Chemistry A (7.4, Q1); Journal of Physical Chemistry; Computational Materials Science (1.87, Q2), J. Power Sources (4.28, Q1), Electrochimica Acta (4,086; Q1), Journal of the Electrochemical Society (2.387, Q1), Journal of Applied Physics. (2.18; Q2), Materials Letters (2.26, Q1), Solid State Ionics (1.6 ; Q2), The Open Inorganic Chemistry Journal, The Open Energy and Fuels Journal, Journal of Solid State Electrochemistry: (2.23, Q2), Journal of Physics and Chemistry of Solids: (1.59, Q2), Journal of Nanoscience and Nanotechnology (1.33, Q3), Ionics (1.83; Q2), Nanoscale (6.73, Q1), Journal of Alloys and Compounds (2.13; Q1), Materials Research Bulletin (2.18; Q2)

Felicitada por la calidad de los trabajos de revisión para la publicación Chemistry of Materials en el año 2009.

Evaluador de proyectos de libros para la editorial Wiley en 2011

EVALUACIÓN DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

- 2006 y 2007. Swiss National Science Foundation.
Financiación solicitada en el proyecto evaluado: **397.600 CHF (280.000 euros)**
- 2016 MINISTERIO DE CIENCIA, TECNOLOGIA E INNOVACION PRODUCTIVA, Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica, Argentina

MIEMBRO DE COMITÉS EDITORIALES

- The Open Energy and Fuels Journal (ISSN: 1874-2483). Desde 2006 a 2008.
- Open Energy and Fuels Reviews (ISSN :1874-2491). Desde 2006 a 2008.
- Open Energy and Fuels Letters (ISSN:1874-2459). Desde 2006 a 2008.
- The Open Fuels & Energy Science Journal (ISSN: 1876-973X). Desde 2008.
- The Open Inorganic Chemistry Journal (ISSN: 1874-0987). Desde 2007 a 2010.
- The Open Renewable Energy Journal (ISSN 1876-3871). Desde 2008.

Tres sexenios por reconocimiento de actividad investigadora. 1994-1999, 2000-2005, 2006-2011.

EVALUACION I3 POSITIVA DICIEMBRE 2007