
APELLIDOS: DELGADO-BARRIO

NOMBRE: GERARDO

SEXO: V

D.N.I.: 33.159.198 FECHA NACIMIENTO: 9/4/1946 N° FUNCIONARIO: 33.159.198/24A5402

DIRECCION PARTICULAR: VIRGEN DEL PILAR, 11; URB. LAS CABAÑAS

CIUDAD: LAS ROZAS (MADRID)

DISTRITO POSTAL: 28230

TELEFONO: 6383570

ESPECIALIZACION (CODIGO UNESCO): 220606, 220607, 220608, 220703, 220705, 221213

FORMACION ACADEMICA

<u>LICENCIATURA/INGENIERIA</u>	<u>CENTRO</u>	<u>FECHA</u>
Lcdo. CC. Físicas	Univ. Complutense Madrid	Junio 1968
Técnico de Sistemas	Univ. Politécnica Madrid	Junio 1973

<u>DOCTORADO</u>		
Dr. CC. Físicas	Univ. Complutense Madrid	Abril 1973
DIRECTOR DE TESIS: Yves Gabriel Smeyers Guillemín		

SITUACION PROFESIONAL ACTUAL

ORGANISMO: C.S.I.C. Instituto de Matemáticas y Física Fundamental

DEPARTAMENTO: Física Atómica, Molecular y de Agregados

CATEGORIA PROFESIONAL Y FECHA DE INICIO: Profesor de Investigación, Enero 1988

DIRECCION POSTAL: C/ Serrano 123; 28006 Madrid

TELEFONO: (91) 590 1607 E-MAIL: gerardo@imaff.cfmac.csic.es

ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARACTER CIENTIFICO O PROFESIONAL

<u>FECHAS</u>	<u>PUESTO</u>	<u>INSTITUCION</u>
1976-1979	Prof. Agregado Interino	Universidad Autónoma Madrid
1979-1982	Colaborador Científico	C.S.I.C., Insto. Estructura Materia
1982-1983	Prof. Adjunto Numerario	Universidad Complutense Madrid
1983-1986	Colaborador Científico	C.S.I.C., Insto. Estructura Materia
1986-1987	Investigador Científico	C.S.I.C., Insto. Estructura Materia

PUBLICACIONES Más de 200 publicaciones en Revistas Científicas,

Tesis doctorales 13 dirigidas

Conferencias y congresos más de 200

PUBLICACIONES los 5 últimos años:

- T. González Lezana, D. López, S. Miret-Artés, F. Gianturco, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
TITULO: Rotation-vibration interaction in ${}^4\text{He}$ trimers
REF. REVISTA : Chem. Phys. Lett. **335** (2001) 105-110.
- F. X. Gadéa, Ph. Durand, T. González Lezana, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
TITULO: Effective resolvent applied to interacting resonances.
REF. REVISTA : Eur. Phys. J. D **15** (2001) 215-219.
- T. González Lezana, J. Rubayo-Soneira, S. Miret-Artés, F. Gianturco, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
TITULO: Reply to Comment on "Efimov states for ${}^4\text{He}$ trimers?"
REF. REVISTA : Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 4190.

- F. A. Gianturco, F. Paesani, I. Baccarelli, G. Delgado-Barrio, T. González Lezana, S. Miret-Artés, P. Villarreal, G. B. Bendazzoli and S. Evangelisti.
 TITULO: The structure of a weakly bound ionic trimer: Calculations for the ${}^4\text{He}_2\text{H}^-$ complex.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **114** (2001) 5520-5530.
- O. Roncero, J. Campos-Martínez, M. I. Henández, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, and J. Rubayo-Soneira.
 TITULO: Photodissociation of $\text{NeBr}_2(B)$ below and above the dissociation limit of $\text{Br}_2(B)$.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **115** (2001) 2566-2575.
- R. Prosmiti, A. A. Buchachenko, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Modeling the H_5^+ potential energy surface: a first attempt.
 REF. REVISTA : Theor. Chem. Acc. **106** (2001) 426-433.
- M. P. de Lara-Castells, R. V. Krems, A. A. Buchachenko, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: Complete basis set extrapolation limit for electronic structure calculations: Energetic and non-energetic properties of HeBr and HeBr_2 van der Waals dimers.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **115** (2001) 10438-10449.
- M. I. Henández, A. García-Vela, J. Campos-Martínez, O. Roncero, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Time-dependent methods to study the dissociation dynamics of tri- and tetra-atomic clusters.
 REF. REVISTA : Com. Phys. Com. **145** (2002) 97-125.
- T. González-Lezana, S. Miret-Artés, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, J. Rubayo-Soneira, I. Baccarelli, F. Paesani, and F. A. Gianturco.
 TITULO: A variational method to treat diffuse states in weakly bound trimers.
 REF. REVISTA : Com. Phys. Com. **145** (2002) 156-183.
- R. Prosmiti, C. Cunha, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: *Ab initio* ground state potential energy surfaces for Rg-Br_2 ($\text{Rg}=\text{He, Ne, Ar}$) complexes.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **116** (2002) 9249-9254.
- C. di Paola, F.A. Gianturco, F. Paesani, G. Delgado-Barrio, S. Miret-Artés, P. Villarreal, I. Baccarelli, F. Paesani, and T. González-Lezana
 TITULO: Ground states of weakly bound three-atom systems: energies and shapes of ${}^4\text{He}_2\text{X}$ clusters from Monte Carlo calculations.
 REF. REVISTA : J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35** (2002) 2643-2660.
- R. Prosmiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: *Ab initio* CCSD(T) potential energy surface for $\text{Ar-I}_2(X)$ complex.
 REF. REVISTA : Chem. Phys. Lett. **359** (2002) 473-479.
- R. Prosmiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, and O. Roncero.
 TITULO: A combined classical/quantum study of the photodissociation dynamics of $\text{NeBr}_2(B)$ near the $\text{Br}_2(B)$ dissociation limit.
 REF. REVISTA : Chem. Phys. Lett. **359** (2002) 229-236.
- C. Cunha, R. Prosmiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Theoretical prediction of a linear isomer for $\text{NeBr}_2(X^1\Sigma_g^+)$: An *ab initio* approach.
 REF. REVISTA : Mol. Phys. **100** (2002) 3231-3237.
- A. A. Buchachenko, R. Prosmiti, C. Cunha, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: $\text{He}^{79}\text{Br}_2$ $B, v = 8 \leftarrow X, v'' = 0$ excitation spectrum: *Ab initio* prediction and spectroscopic manifestation of a linear isomer.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **117** (2002) 6117-6120.
- T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, and F. X. Gadéa.
 TITULO: Application of the stabilization method to interacting resonances.
 REF. REVISTA : Eur. Phys. J. D **20** (2002) 227-232.
- R. Prosmiti, C. Cunha, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: The van der Waals potential energy surfaces and structures of He-ICl and Ne-ICl clusters.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **117** (2002) 7017.
- R. Prosmiti, C. Cunha, A.A. Buchachenko, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: Vibrational predissociation of $\text{NeBr}_2(X, v = 1)$ using an *ab initio* potential energy surface.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **117** (2002) 10019-10025.
- C. di Paola, F.A. Gianturco, G. Delgado-Barrio, S. Miret-Artés and P. Villarreal.
 TITULO: The ${}^4\text{He}$ trimer: Structure and energetics of a very unusual molecule.
 REF. REVISTA : Collect. Czech. Chem. Commun. **68** (2003) 1-22.

- R. Prosimiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Structure and Energetics of H_n^+ clusters ($n = 5 - 11$)
 REF. REVISTA : J. Phys. Chem. A **107** (2003) 4768-4772.
- Á. Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: CCSD(T) potential energy surface and bound rovibrational level calculations for the $Ar - ICl(X)$ complex.
 REF. REVISTA : Chem. Phys. Lett. **375** (2003) 328-336.
- M.I. Hernández, T. González-Lezana, A.A. Buchachenko, R. Prosimiti, M.P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: Photo-predissociation of the $^4He^{79}Br_2$ complex: From empirical to *ab initio* potential energy surfaces .
 REF. REVISTA : Recent Res. Devel. Chem. Physics **4** (2003) 1
- R. Prosimiti, C. Cunha, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: CCSD(T) intermolecular potential between He atom and ClF molecule: Comparison with experiment.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **119** (2003) 4216-4222.
- R. Prosimiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Structure and bonding of Ar-ClF complex .
 REF. REVISTA : Israel. J. Chem. **43** (2003) x1-x8 .
- M. P. de Lara-Castells, A. A. Buchachenko, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: The open-shell interaction of He with the $B3\Pi_u(O^+)$ state of Br_2 : An ab-initio study and its comparison with a diatomics-in- molecule perturbation model.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **120** (2004) 2182-2192.
- R. Prosimiti, Á. Valdés, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: Three-Dimensional *Ab initio* Potential and ground state dynamics of HeI_2 complex.
 REF. REVISTA : J. Phys. Chem. **A108** (2004) 6065-6071.
- D. López-Durán, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di. Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek.
 TITULO: Raman spectra of $(He)_N-Br_2(X)$ clusters: The role of boson/fermion statistics in a quantum solvent.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **121** (2004) 2975-2984.
- D. López-Durán, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di. Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek.
 TITULO: The role of Boson/Fermion statistics on the Raman spectra of $Br_2(X)$ in Helium Clusters.
 REF. REVISTA : Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 053401.
- Alvaro Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: $HeBr_2$ complex: a ground state potential and vibrational dynamics from *ab initio* calculations.
 REF. REVISTA : Mol. Phys. **102** (2004) 2277-2283
- I. Baccarelli, F.A. Gianturco, T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, S. Miret-Artés, and P. Villarreal.
 TITULO: A complete configurational study for the bound states of Ne trimers.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **122** (2005) 084313.
- Alvaro Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
 TITULO: *Ab initio* calculations, potential representation and vibrational dynamics of He_2Br_2 van der Waals complex.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **122** (2005) 044305-1.
- M. P. de Lara-Castells, D. López-Durán, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, C. Di Paola, F. A. Gianturco, and J. Jellinek.
 TITULO: Energies and density distributions of $(^4He)_N$ clusters doped with $Br_2(X)$: a Hartree-like approach.
 REF. REVISTA : Phys. Rev. A **71** (2005) 033203.
- F. A. Gianturco, T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, and P. Villarreal.
 TITULO: The binding of 4He and 3He to a hydrogen molecule: A computational study for pH_2 and oH_2 .
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **122** (2005) 084308.
- I. Baccarelli, F. A. Gianturco, T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, S. Miret-Artés S, and P. Villarreal.
 TITULO: Bound-state energies in argon trimers via a variational expansion: The effects from many-body corrections.
 REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **122** (2005) 144319.

- C. Di Paola, F. A. Gianturco, D. López-Durán, M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, and J. Jellinek.
TITULO: Br₂(X) Microsolvation in Helium cluters: Effect of the interaction on the Quantum solvent density distribution.
REF. REVISTA : Chem. Phys. Chem. **6** (2005) 1348-1356.
 - G. Delgado-Barrio, R. Prosimiti, A. Valdés, and P. Villarreal.
TITULO: An overview on Potential Energy Surfaces of rare gas-dihalogen van der Waals complexes.
REF. REVISTA : Phys. Scr **73** (2006) C57-C63.
 - Alvaro Valdés, R. Prosimiti, P. Villarreal, and G. Delgado-Barrio.
TITULO: A Theoretical Study of the He₂ICl van der Waals complex.
REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **125** (2006) 014313-1-10.
 - I. Baccarelli, F. A. Gianturco, T. González-Lezana, G. Delgado-Barrio, S. Miret-Artés S, and P. Villarreal.
TITULO: Rovibrational Structures in Floppy Triatomics: Distributed Gaussian Functions Treatment for the Ne₂H⁻ System.
REF. REVISTA : J. Phys. Chem. A **110** (2006) 5487.
 - M. P. de Lara-Castells, M. I. Hernández, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal, and M. López-Puertas.
TITULO: Vibrational quenching of CO₂(010) by collisions with O(³P) at thermal energies: A quantum-mechanical study.
REF. REVISTA : J. Chem. Phys. **124** (2006) 164302.
 - M. P. de Lara-Castells, R. Prosimiti, G. Delgado-Barrio, D. López-Durán, P. Villarreal, F. A. Gianturco, and J. Jellinek.
TITULO: Polar di-halogen molecules solvated in bosonic helium clusters: The paradigm of ICL(X).
REF. REVISTA : Phys. Rev. A **74** (2006) 053201.
 - M. P. de Lara-Castells, G. Delgado-Barrio, P. Villarreal and Alexander O. Mitrushenkov.
TITULO: An efficient Full-CI nuclear orbital treatment: small doped fermionic He clusters.
REF. REVISTA : J. Chem. Phys. (communications) (in press) (2006)
-

OTROS MERITOS

- | | |
|---------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1977 | Premio “Novel de Física” de la Real Sociedad Española de Física y Química |
| 1983 | Medalla de Oro de la Real Sociedad Española de Física |
| 1985 | Profesor invitado por la Universidad de Roma |
| 1986–96 | Representante Español del MOLEC |
| 1988–95 | Primer Presidente del Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular (GEFAM) |
| 1988 | Organizador del 1 ^{er} Congreso Nacional del GEFAM |
| 1988 | Profesor Invitado por la Universidad de Haifa (Israel) |
| 1989-90 | Presidente organizador del II y III Congreso Nacional del GEFAM |
| 1991–95 | Representante de la Península Ibérica en el International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC) |
| 1991 | Representante Español en la División de Ciencia y Sociedad de la European Physical Society (EPS) |

- 1991 **Organizador de la Ist Southern European School of Physics European Physical Society (EPS)**
- 1991 **Editor del libro *Dynamical Processes in Molecular Physics***
- 1992 **Organizador del Ist South European Conference on Atomic and Molecular Physics (Ist SECAMP)**
- 1992-96 miembro del board del SECAMP
- 1993-95 Organizador del 1st y 2nd Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
- 1993-95 Representante en España del Programa COST
- 1994 **Organizador de la X European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (X MOLEC)**
- 1995-1998 Miembro del Board de la Atomic and Molecular Physics Division de la European Physical Society (EPS)
- 1995-2001 **Presidente de la Chemical-Physics Section de la Atomic and Molecular Physics Division de la European Physical Society (EPS)**
- 1997- Miembro del Board del IGPD (EPS)
- 1997-2006 **Presidente de la Real Sociedad Española de Física**
- 1998 **Doctor HONORIS CAUSA Instituto Superior de Ciencia y Tecnología Nucleares, ciudad de la Habana, Cuba**
- 1998–2005 **Miembro del Scientific Board de la Revista Europhysics Letters**
- 1999 **Fellow del Institute of Physics**
- 2000-2002 **Presidente del Scientific Advisory Board de la Revista European Physics Journal**
- 2000,2003 Presidente del Comité Organizador de la 5^a y 8^a Reunión de Presidentes de Física de Iberoamérica
- 2001-2006 **Miembro del comité ejecutivo de la European Physical Society**
- 2001-2004 **Miembro de la junta de Gobierno del C.S.I.C.**
- 2002 **Miembro del Board of editors de la Revista Europhysics Letters**
- 2003 Presidente del Comité Organizador de la reunión en Madrid del Board de la European Physical Society
- 2003 **Presidente del Comité Organizador del Centenario de la Real Sociedad Española de Física**
- 2003-2006 Miembro del Scientific Advisory Board de la Revista European Physics Journal
- 2003– Miembro del Editorial Board of Progress in Theoretical Chemistry and Physics
- 2004– Miembro del International Organizing Committee of VIII European Conference on Atomic and Molecular Physics
- 2004– Miembro del International Organizing Committee of IX, X,XI,XII European Workshops on Quantum Systems in Chemistry and Physics
- 2004-2006 **Responsable de Relaciones Internacionales de la European Physical Society**
- 2005 **Presidente del Comité Organizador del Año Mundial de la Física en España**
- 2005-2008 **Presidente de La Unión Internacional de Física Pura y Aplicada de España**
- 2005-2008 **Presidente de La Federación Iberoamericana de Sociedades de Física FEIASOFI**
- 2006 Presidente del Comité Organizador de la 1^a Reunión de FEIASOFI
- 2006-2010 **Director del Instituto de Matemáticas y Física del CSIC**