



## Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA	18/06/2019
---------------	------------

Nombre y apellidos	JUAN CARLOS ANGULO IBÁÑEZ		
DNI/NIE/pasaporte	24211380Q	Edad	53
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	C-8660-2011	
	Código Orcid	0000-0002-3188-4537	

### A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Granada		
Dpto./Centro	Física Atómica, Molecular y Nuclear / Facultad de Ciencias		
Dirección	Av. Fuentenueva s/n, 18071-Granada, Andalucía, España		
Teléfono	958243218	Correo electrónico	<a href="mailto:angulo@ugr.es">angulo@ugr.es</a>
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	25/11/2017
Espec. cód. UNESCO	2207.02 2207.03 2207.04 2206.08 2210.23 1202.06		
Palabras clave	Estructura electrónica: densidades de carga, momento y pares electrónicos. Entropías de información. Relaciones de incertidumbre. Información mutua. Medidas de deslocalización, complejidad y divergencias en sistemas multifermiónicos. Entrelazamiento e Información Cuántica. Efectos relativistas.		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Física	Universidad de Granada	1988
Doctorado en Física	Universidad de Granada	1993

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

Participación en 22 proyectos de investigación:

4 internacionales, 9 nacionales (uno como IP), 9 autonómicos.

Sexenios: 5 (años 1989 a 2018)

Último sexenio concedido: 2013-2018

Tesis doctorales dirigidas: 4 (dos con mención internacional, y un doctorado europeo)

Director de tres trabajos de fin de máster.

Citas totales: 1321 Promedio de citas/año últimos 5 años (2014-2018): 70.80

Publicaciones totales en revistas: 90 En Q1: 38 Índice h: 21

5 capítulos de libros, eds. Bentham Sc. (Sharjah, 2016), Nova Sc. (Nueva York, 2012), Intech (Rijeka, 2012), Springer (Londres, 2011), Springer (Nueva York, 2009).

## Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

En años recientes, las principales líneas de investigación se desarrollan en el marco de la Teoría de Información, y tienen como pilares básicos conceptos como complejidad, divergencia, funcionales de carácter global/local, espacios conjugados, incertidumbre. Más allá de los resultados de carácter universal, principales aplicaciones con distribuciones en sistemas cuánticos: átomos, moléculas... Aparecen relevantes descriptores de propiedades y fenómenos físicos: estructura de capas, enlaces químicos, efectos relativistas, ionización,



excitación, entrelazamiento. Análisis entrópico de nanoestructuras y dendrímeros. Estudio teórico-informacional del estado de transición y formación/ruptura de enlaces en reacciones de intercambio y de inserción a tres centros. Complejidad y planos de información moleculares. Entrelazamiento cuántico y disociación molecular. Similitud cuántica en sistemas multielectrónicos. Complejidad atómica en procesos de ionización. Divergencia Jensen-Shannon y divergencias generalizadas de densidades monoparticulares en sistemas multielectrónicos. Densidad a dos cuerpos, correlación interelectrónica e información mútua. Etapas previas: 1) Estructura de densidades a uno y dos cuerpos. 2) Relaciones rigurosas entre valores locales y valores esperados. 3) Cotas a funcionales de la densidad. 4) Aplicaciones en átomos neutros, iones y series isoelectrónicas. 5) Incertidumbre en sistemas multifermiónicos: generalización del principio de Heisenberg. 6) Cotas a distribuciones con técnicas de Stieltjes-Chebyshev y aproximantes de Padé. 7) Técnicas de Máxima-Entropía y Mínima-Entropía-Relativa. 8) Perfil Compton, factor de forma, intensidad de scattering. 9) Campo Coulombiano desnudo y átomo de Hooke. 10) Extensión a dimensionalidad arbitraria.

Colaboración con grupos de ámbito nacional e internacional. Estancias en los centros de S. Fraga (Univ. Alberta, Canadá), V.H. Smith Jr. (Queen's University, Canadá), J.P. Perdew (Tulane University, EE.UU.), R.O. Esquivel (UAM, México). En mi centro: T. Koga (Muroran Inst. of Technology, Japón), K.D. Sen (Univ. Hyderabad, India).

Responsable grupo investigación FQM-020 (Física y Química de la Información), Junta de Andalucía. Desde 13 de Enero de 2011.

Publicaciones en revistas de prestigio internacional (Phys. Rev. A, J. Phys. B, J. Chem. Phys., Int. J. Quantum Chem., Journal of Chemical Theory and Computation, J. Phys. Chem., Theor. Chem. Acc., Phys. Chem. Chem. Phys., Eur. Phys. J. D, Physica A, J. Math. Phys., J. Molec. Struct..).

Presentación de numerosas ponencias en congresos, principalmente internacionales.

Tutor vinculado de forma permanente al Programa de Doctorado-Máster FISYMAT (Mención de Calidad del Ministerio: MCD2006-00391), desde su inicio en el curso 1997/1998.

Etapas académicas/profesionales (Universidad de Granada): Beca predoctoral (1989-1992, Premio Extraordinario Doctorado 1993); Prof. Ayudante LRU Fac. (1992-1994); Prof. Asociado (1994-1997); Prof. Titular Univ. (1997-2017); Catedrático Univ. (desde Noviembre 2017).

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

### **C.1. Publicaciones**

S. López-Rosa, A.L. Martín, J. Antolín, J.C. Angulo, *Electron-pair entropic and complexity measures in atomic systems*. International Journal of Quantum Chemistry 119 (2019) e25861.

J. Angulo, J.C. Angulo, J.M. Angulo. *An application of information theory to stochastic classical gravitational fields*. Physica A 499 (2018) 129-141.

A.L. Martín, S. López-Rosa, J.C. Angulo, J. Antolín. *Generalized quantum similarity in atomic systems: A quantifier of relativistic effects*. Physica A 467 (2017) 315-325.



R.O. Esquivel, S. López-Rosa, M. Molina-Espíritu, J.C. Angulo, J.S. Dehesa. *Information-theoretic space from simple atomic and molecular systems to biological and pharmacological molecules*. Theoretical Chemistry Accounts. 135 (2016) 1-6.

A.L. Martín, S. López-Rosa, J.C. Angulo, J. Antolín. *Jensen-Shannon and Kullback-Leibler divergences as quantifiers of relativistic effects in neutral atoms*. Chem. Phys. Lett. 635(2015)75.

J. Antolín, J.C. Angulo, S. Mulas, S. López-Rosa. *Relativistic global and local divergences in hydrogenic systems: A study in position and momentum spaces*. Phys.Rev.A 90(2014) 042511.

M. Molina-Espíritu, R.O. Esquivel, M. Kohout, J.C. Angulo, J.A. Dobado, J.S. Dehesa, S. López-Rosa, C. Soriano-Correa. *Insight into the informational-structure behavior of the Diels-Alder reaction of cyclopentadiene and maleic anhydride*. J. Mol. Modeling. 20 (2014) 2361.

P. Sánchez-Moreno, J.C. Angulo, J.S. Dehesa. *A generalized complexity measure based on Rényi entropy*. European Physical Journal D. 68 (2014) 212.

M. Molina-Espíritu, R.O. Esquivel, J.C. Angulo, J.S. Dehesa. *Concurrent phenomena at the reaction path of the SN2 reaction CH3Cl+F-. Information planes and statistical complexity analysis*. Entropy 15 (2013) 40844104.

A.L. Martín, S. López-Rosa, J.C. Angulo, J. Antolín. *Fisher-like atomic divergences: Mathematical grounds and physical applications*. Physica A 392 (2013) 5552-5563.

## C.2. Proyectos

FIS2014-59311-P. Información y complejidad en sistemas multielectrónicos. Aplicaciones físicas, biotecnológicas y farmacológicas. (J.C. Angulo, Universidad de Granada). Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (MINECO). 2015-2018. Universidades de Granada, Zaragoza, Sevilla y Autónoma Metropolitana (México). 36300 €.

P11-FQM-7276. Teoría de la aproximación, funciones especiales y modelos matemáticos: de la teoría a las aplicaciones oftalmológicas. (Andrei Martínez-Finkelstein, Universidad de Almería). Junta de Andalucía. 2013-2017. Universidades de Almería, Granada, Sevilla y Politécnica de Madrid, y Clínica Oftalmológica VISSUM de Almería. 239478,3 €.

FIS2011-24540. Física de la información, sistemas ultrafríos, no-linealidad. Aplicaciones multidisciplinarias. (J.S. Dehesa, Universidad de Granada). Ministerio de Ciencia e Innovación. 2012-2015. Universidades de Granada, Zaragoza, Sevilla y Bayreuth (Alemania). 107.690 €.

P09-FQM-4643. Aproximación y complejidad cuántica: teoría y aplicaciones científicas y tecnológicas. (A.J. Durán Guardado, Universidad de Sevilla). Junta de Andalucía. 2010-2014. Universidades de Granada, Sevilla y Almería. 293.939'69 €.



FIS2008-02380. Sistemas atómicos, moleculares y no-lineales: espectroscopía, fenómenos de transporte y medidas de información. (J.S. Dehesa, Universidad de Granada). Ministerio de Ciencia e Innovación. 2009-2011.

Universidades de Granada, Sevilla y Zaragoza. 153670 €.

P06-FQM-01735. Ortogonalidad, no-linealidad y teoría de la información: interacciones y aplicaciones físicas, clínicas y nanotecnológicas. (Andrei Martínez-Finkelstein, Universidad de Almería). Junta de Andalucía. Junio 2007 - Mayo 2010.

Universidades de Almería, Granada y Sevilla. 152.799'88 €.

FIS2005-00973. Propiedades espectroscópicas y teoría de información en sistemas atómicos, moleculares y no-lineales. (J.S. Dehesa, Universidad de Granada). Ministerio de Educación y Ciencia. 2006-2008.

Universidades de Granada, Sevilla y Zaragoza. 75.000€.

P05-FQM-481. Funciones especiales, entropías cuánticas y aplicaciones bio- y nanotecnológicas. (J.S. Dehesa, Universidad de Granada). Junta de Andalucía. 2006-2009. Universidad de Granada. 85.000 €.

### C.3. Organización de congresos

VII Simposium sobre polinomios ortogonales y aplicaciones (Granada, 1991). Secretario.

Density functionals of quantum-mechanical systems and constructive complex analysis (Granada, 1995).

Special functions, information theory and mathematical physics (Granada, 2007).

Jornadas sobre 'Sistemas Complejos y Teoría de la Información' (Granada, 2013).

Jornadas sobre 'Información Cuántica y Aplicaciones' (Granada, 2014).

Jornada sobre 'Información, Ortogonalidad y Simetría' (Granada, 2017).

### C.4. Actividad editorial

Miembro del Consejo Editorial de 'Dataset Papers in Physical Chemistry' (Hindawi Publishing Corporation), de Febrero-2012 a Septiembre-2017.

Referee de: Physics Letters A (Elsevier), Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics), Physica A (Elsevier), Entropy (Molecular Diversity Preservation International), Applied Mathematics and Computation (Elsevier), Journal of Computational and Applied Mathematics (Elsevier), Chemical Physics Letters (Elsevier), International Journal of Applied Mathematics and Statistics (Ceser, India).

### C.5. Gestión y difusión de la actividad científica

Responsable del grupo de investigación FQM-020 (Junta de Andalucía), desde 13-1-2011.

Miembro del grupo de investigación FQM-207 (Junta de Andalucía), 1-1-1990 a 13-1-2011.

Socio numerario de la Real Sociedad Española de Física (desde 30 de mayo de 1990).

Investigador asociado al Instituto 'Carlos I' de Física Teórica y Computacional (Univ. Granada, desde 15 de mayo de 1995).

### C.6. Otros méritos

Autor del libro *Variable compleja. Resolución de problemas y aplicaciones*. Ediciones Paraninfo S.A. (2012). ISBN 8428300119, 430 páginas.