

**Parte A. DATOS PERSONALES**

**Fecha del CVA**

14/12/2020

Nombre y apellidos	Sheila López Rosa		
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	K-2137-2014	
	Código Orcid	0000-0002-7667-8462	
	Scopus	8390999000	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Dpto de Física Aplicada II (E.T.S. Ingeniería de Edificación)		
Categoría profesional	Profesora Titular de Universidad	Fecha inicio	25/02/2020
Espec. cód. UNESCO	2207.03 // 2207.12 // 2207.04 // 2207.99 (Teoría de información)		
Palabras clave	Teoría de Información. Física Atómica y Molecular. Complejidad. Divergencias. Entropía. Entanglement		

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciada Física	Universidad de Granada	2005
Máster en Física y Matemáticas	Universidad de Granada	2007
Doctora en Física	Universidad de Granada	2010

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

- Número de sexenios de investigación reconocidos: 2 (último concedido 2012-2017).
- Número de citas recibidas: 561
- Índice h: 14
- Trabajos Fin de Máster dirigidos: 1
- Tesis doctorales dirigidas: 1
- Publicaciones en revistas indexadas: 39. En el primer cuartil (Q1): 16. Por terciles: T1:21, T2:17.
- Proyectos de investigación: 13

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

Mi investigación se ha desarrollado en el marco de la Teoría de Información aplicada a la descripción de sistemas atómicos y moleculares, así como de diferentes procesos y reacciones químicas. He llevado a cabo diferentes aplicaciones de medidas teórico-informacionales, tales como magnitudes entrópicas, complejidades, medidas de similitud, divergencias, entanglement, etc, al análisis de sistemas físico-químicos con el fin de describir propiedades relacionadas con su estructura electrónica, y diversas propiedades químicas, entre las que destaca la reactividad química. Este tratamiento proporciona una representación teórico-informacional de los estados atómicos y moleculares, que complementa a la representación energética proporcionada por las teorías basadas en la función de onda y los métodos funcionales de la densidad.

Mi carrera investigadora comenzó en 2004 y se ha desarrollado de forma ininterrumpida financiada mediante diferentes becas y contratos, tanto predoctorales (Beca de Iniciación de la Universidad de Granada, Beca de colaboración del Ministerio de Educación, Beca predoctoral asociada a Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía, Beca predoctoral FPU del Ministerio de Educación) como postdoctorales (Contrato Puente de la UGR), todos ellos conseguidos en procesos competitivos. Defendí mi tesis doctoral en junio de 2010 obteniendo la calificación de Sobresaliente Cum Laude por Unanimidad y con Mención de Doctorado Europeo. En junio de 2014 se me otorgó el Premio Extraordinario de Tesis Doctoral por parte de la Escuela Internacional de Posgrado de la Universidad de Granada. En octubre de 2011 trabajo en la Universidad de Sevilla, tras desempeñar diferentes puestos (Profesora Ayudante, Profesora Ayudante Doctora, Profesora Contratada Doctora), desde febrero de 2020 como Profesora Titular de Universidad en el departamento de Física Aplicada II. Actualmente pertenezco al grupo de investigación

de la Junta de Andalucía “Fundamentos de Mecánica Cuántica” de la Universidad de Sevilla (FQM-239). Anteriormente (hasta enero de 2012) pertencí al Grupo de “Física Atómica y Molecular” de la Universidad de Granada (FQM-207).

Mi productividad científica se resume en: 39 publicaciones en revistas indexadas, 1 publicación en revista no indexada, 6 capítulos de libro (dos de ellos editados por Springer) 1 libro completo editado por LAP Lambert Academic Publishing, 28 aportaciones a congresos, en su mayoría internacionales, y la participación en la organización de 3 congresos internacionales. He participado en 13 proyectos de investigación: 6 de ámbito nacional (FIS2005-00973, FIS2008-02380, FIS2011-24540, FIS2014-60843P, FIS2014-59311P, FIS2017-89609P), 6 de ámbito autonómico (P05-FQM-481, P06-FQM-01735, P06-FQM-2445, P09-FQM-4643, FQM-207, FQM-239) y 1 dentro Campus de Excelencia Internacional CEI BioTIC GENIL del MICINN: PYR-2010-27, del cual he sido la investigadora principal. Pertenezco al Instituto 'Carlos I' de Física Teórica y Computacional de la Universidad de Granada desde 2005, y a la Real Sociedad Española de Física y a su Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde 2010.

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

### C.1. Publicaciones

#### Publicaciones de los últimos 5 años

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) 25861.

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

S. López-Rosa; I. V. Toranzo; P. Sánchez-Moreno; J. S. Dehesa. *Response to "Comment on 'Entropy and complexity analysis of hydrogenic Rydberg atoms'". [J. Math. Phys. 58, 104101 (2017)]*. Journal of Mathematical Physics 58 (2017) 104102.

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) 253.

S. López-Rosa, Z.P. Xu; A. Cabello. *Maximum nonlocality in the (3,2,2) scenario*. Physical Review A. 94 (2016) 062121.

S. López-Rosa, M. Molina-Espíritu, R.O. Esquivel, C. Soriano-Correa, J.S. Dehesa. *Study of the chemical space of selected bacteriostatic sulfonamides from an information-theoretical point of view*. ChemPhysChem. 17 (2016) 4003.

M. Molina-Espíritu, R.O. Esquivel, S. López-Rosa, J.S. Dehesa. *Quantum entanglement and chemical reactivity*. Journal of Chemical Theory and Computation 11 (2015) 5144.

R.O. Esquivel, S. López-Rosa, J.S. Dehesa. *Correlation energy as a measure of non-locality: quantum entanglement of helium-like systems*. EPL (Europhysics Letters) 111 (2015) 40009.

R.O. Esquivel, M. Molina-Espíritu, S. López-Rosa, C. Soriano-Correa, C. Barrientos-Salcedo, M- Kohout, J.S. Dehesa. *Predominant information quality scheme for the essential amino acids: an information-theoretical analysis*. ChemPhysChem 16 (2015) 2571.

I.V. Toranzo, S. López-Rosa, R.O. Esquivel, J.S. Dehesa. *Heisenberg-like and Fisher-information-based uncertainty relations for N-electron d-dimensional systems*. Physical Review A 91 (2015) 062122.

I.V. Toranzo, S. López-Rosa, R.O. Esquivel, J.S. Dehesa. *Extremum-entropy-based Heisenberg-like uncertainty relations*. Journal of Physical A 49 (2015) 025301.

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*. Chemical Physics Letters 635 (2015) 75.

S. López-Rosa, R. O. Esquivel, A. R. Plastino, J. S. Dehesa. *Quantum entanglement of helium-like systems with varying-Z: compact state-of-the-art CI wave functions*. Journal of Physics B 48 (2015) 175002.

### Otras publicaciones relevantes

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

P. A. Bouvrie; S. López-Rosa; J. S. Dehesa. *Quantifying Dirac hydrogenic effects via complexity measures*. Physical Review A 86 (2012) 012507.

S. López-Rosa, R.O. Esquivel, J.C. Angulo, J. Antolín, J.S. Dehesa, N. Flores-Gallegos. *Fisher information study in position and momentum spaces for elementary chemical reactions*. Journal of Chemical Theory and Computation 6 (2010) 145.

R.O. Esquivel, J.C. Angulo, J. Antolín, J.S. Dehesa, S. López-Rosa, N. Flores-Gallegos. *Analysis of complexity measures and information planes of selected molecules in position and momentum spaces*. Physical Chemistry Chemical Physics 12 (2010) 7108.

S. López-Rosa; J. Antolín; J. C. Angulo; R O. Esquivel. *Divergence analysis of atomic ionization processes and isoelectronic series*. Physical Review A 80 (2009) 012505.

J. Antolín; J. C. Angulo; S. López-Rosa. *Fisher and Jensen-Shannon divergences: quantitative comparisons among distributions. application to position and momentum atomic densities*. Journal of Chemical Physics 130 (2009) 074110.

### C.2. Proyectos

*Título:* Herramientas cuánticas para información computación e investigación (*Referencia:* FIS2017-89609P)

*Entidad Financiadora:* Ministerio de Economía, Industria y Competitividad.

*Duración:* 01/01/2018-31/12/2020.

*Investigador principal:* Adán Cabello Quintero (Universidad de Sevilla).

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Sevilla.

*Título:* Información cuántica avanzada (*Referencia:* FIS2014-60843P)

*Entidad Financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad.

*Duración:* 01/01/2015-31/12/2017.

*Investigador principal:* Adán Cabello Quintero (Universidad de Sevilla).

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Sevilla.

*Título:* Información y complejidad en sistemas multielectrónicos. Aplicaciones físicas, biotecnológicas y farmacológica (*Referencia:* FIS2014-59311P).

*Entidad Financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad.

*Duración:* 01/01/2015-31/12/2017.

*Investigador principal:* Juan Carlos Angulo Ibáñez (Universidad de Granada).

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Granada, Sevilla y Zaragoza.

*Título:* Física de la información, sistemas ultrafríos, non linealidad. Aplicaciones multidisciplinares (*Referencia:* FIS2011-24540).

*Entidad Financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación.

*Duración:* 01/01/2012-31/12/2014.

*Investigador principal:* Jesús S. Dehesa (Universidad de Sevilla).

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Granada, Sevilla y Zaragoza.

*Título:* Quantum reactions dynamics based on information theory (*Referencia:* PYR-2010-27).

*Entidad Financiadora:* Campus de Excelencia Internacional CEITIC BIOTIC (CEB09-0010) del Ministerio de Ciencia e Innovación.

*Duración:* 01/07/2011-31/12/2011

*Investigador principal:* Sheila López Rosa

*Tipo de participación:* Investigador principal. *Entidades participantes:* Universidad de Granada

*Título:* Ortogonalidad, aproximación y complejidad cuántica: teoría y aplicaciones científicas y tecnológicas (*Referencia:* P09-FQM-4643).

*Entidad Financiadora:* Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía.

*Duración:* 01/11/2009-30/10/2013

*Investigador principal:* Antonio Durán Guardado (Universidad de Sevilla)

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Granada y Sevilla.

*Título:* Entropías cuánticas (*Referencia:* P06-FQM-2445).

*Entidad Financiadora:* Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía.

*Duración:* 01/05/2007-15/04/2013.

*Investigador principal:* Jesús S. Dehesa y Ángel R. Plastino (Universidad de Granada).

*Tipo de participación:* Investigador. *Entidades participantes:* Universidad de Almería, Granada y Sevilla.

### **C.5. Dirección de Trabajos Fin de Máster**

Sadig Gassim Al Seed Mulas, “Divergencias relativistas en sistemas hidrogenoides: Estudios en los espacios de posiciones y momentos”.

Máster de Postgrado en Física y Matemáticas “FISYMAT” Curso 2013-14. Fecha de defensa: 14 Julio 2014

### **C.6. Dirección de Tesis Doctoral**

Adrián López Martín, “Medidas de información cuántica: propiedades y análisis de la estructura y dinámica de sistemas multielectrónicos”. Calificación: Sobresaliente Cum Laude por Unanimidad.

Programa de doctorado en Física y Matemáticas “FISYMAT”. Fecha de defensa: 30 enero 2018.

### **C.7. Premios y Menciones**

14/06/2014 Premio Extraordinario de Tesis Doctoral. Área de Ciencias Experimentales. Curso 2009-10. Otorga: Escuela Internacional de Posgrado. Universidad de Granada

### **C.8. Organización de eventos científicos**

Miembro del Comité Local Organizador del congreso: “Special Functions, Information Theory and Mathematical Physics. An interdisciplinary conference in honor of Prof. J.S. Dehesa’s 60<sup>th</sup> birthday”, celebrado en Granada, 17-19/09/2007.

Miembro del Comité Local Organizador del congreso: “MUARC & MPAGs Summer School on Quantum Matter: Foundations and New Trends”, celebrado en Granada, 18-21/09/2011.

Miembro del Comité Organizador del congreso: “IV Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM2012)”, celebrado en Granada, 01-03/02/2012.