

Parte A. DATOS PERSONALES

Fecha del CVA 31/03/2025

Nombre y apellidos	Paula Gómez Álvarez		
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	AAF-4294-2020	
	Código Orcid	0000-0001-9440-0600	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Huelva		
Dpto./Centro	Departamento de Ciencias Integradas/ CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible		
Dirección	21007 Huelva		
Categoría profesional	Profesora Titular de Universidad	Fecha inicio	09/01/2023
Espec. cód. UNESCO	2206,2210,2213		
Palabras clave	Simulación molecular/ fluidos complejos/ equilibrio de fases e interfase/materiales porosos/adsorción/ enlace de hidrógeno		

A.2. Situación profesional anterior

Universidad de Huelva	02/2022-01/203	Profesor Contratado Doctor
Universidad de Huelva	04/2018-02/2022	Profesor Ayudante Doctor
Universidad de Huelva	10/2017-04/2018	Profesor Sustituto Interino
IQFR-CSIC	01/2017-09/2017	Investigadora Postdoctoral
Universidad Pablo de Olavide	01/2013-12/2016	Investigadora Postdoctoral
Universidade de Vigo	2008-2012	Becaria FPU

A.3. Formación académica (título, institución, fecha)

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Física	Universidad de Vigo	2007
Diploma de estudios avanzados (DEA)	Universidad de Vigo	2009
Master Universitario en Física Aplicada	Universidad de Vigo	2010
Doctora en Física Aplicada	Universidad de Vigo	2012

A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)
37 JCR, con 30 en Q1 de su categoría y la mayoría como primera autora o correspondiente*

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

Paula Gómez Álvarez comenzó su carrera científica en el último curso de la Licenciatura de Física con una beca de colaboración en departamentos. Se licenció en 2007 por la Universidad de Vigo con nota de 3.85 sobre 4, obteniendo Premio Extraordinario de fin de carrera y segundo premio nacional. Se le concedió la beca predoctoral de la Xunta de Galicia (2007-2008) y la de Formación del Profesorado Universitario (2008-2012) del Ministerio de Ciencia e Innovación para realizar la tesis en el Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Vigo. Su tesis versa en el estudio del efecto de los enlaces de hidrógeno en la estructura y termodinámica de sustancias asociadas usando técnicas de simulación molecular. Realizó una estancia predoctoral de 4 meses en la Université de Pau et des Pays de l'Adour en Francia, donde llevó a cabo experimentos sobre el tema. Así mismo, durante el periodo predoctoral Paula Gómez adquirió experiencia docente con 120 horas de clase como becaria FPU. Defendió la tesis en septiembre de 2012 y obtuvo Apto Cum Laude, con mención europea y posterior Premio Extraordinario de Tesis. De enero de 2013 a diciembre de 2016, extendió su investigación a fluidos confinados en materiales porosos en la Universidad Pablo de Olavide (UPO, Sevilla) con un contrato posdoctoral financiado por ERC Starting Grant. De enero a septiembre de 2017, Paula Gómez continúa esta línea de investigación con un contrato postdoctoral en el IQFR-CSIC (Madrid). Desde octubre de 2017 trabaja en la Universidad de Huelva (UHU), con figuras de PSI, Ayudante

Doctora, Contratada Doctora y actualmente (desde enero de 2023) Profesora Titular. En diciembre de 2017, le fue concedida la beca postdoctoral Juan de la Cierva-Incorporación para la UHU (a la que renunció). Hasta la fecha, Paula Gómez es autora de 37 artículos publicados en revistas indexadas en el Journal Citation Reports (JCR), con 30 en el primer cuartil Q1 de su categoría, la mayoría como primera autora o correspondiente. Ha participado con numerosas contribuciones en congresos nacionales e internacionales, y en numerosos proyectos competitivos de I+D+i. Ha co-dirigido una Tesis doctoral, defendida en la UPO en 2019. Está acreditada por la ANECA para las figuras de profesora Ayudante Doctor y Contratado Doctor desde diciembre de 2014, y para profesora Titular de Universidad desde enero de 2022.

Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

C.1. Publicaciones

1. J. Algaba, A. Morales-Aragon, C. Romero-Guzman, P. Gómez-Álvarez, F. J. Blas, Interfacial properties of square-well chains from molecular dynamics simulation, *Molecular Physics* 2023, DOI: 10.1080/00268976.2023.2195022.
2. P. Gómez-Álvarez, E.G. Noya, E. Lomba, Structural study of water/alcohol mixtures adsorbed in MFI and MEL porosils, *Journal of Molecular Liquids* 2022, 368, 120527. Índice de impacto en el año de publicación: 6.633
3. J. Algaba, B. Mendiboure, P. Gómez-Álvarez, F. J. Blas, Density functional theory for the prediction of interfacial properties of molecular fluids within the SAFT- coarse-grained approach, *RSC Advances* 2022, 12, 18821-18833. DOI: 10.1039/D2RA02162E. Índice de impacto en el año de publicación: 4.036
4. J. Algaba, J.M. Míguez, P. Gómez-Álvarez, A. Mejía, F. J. Blas, Preferential Orientations and Anomalous Interfacial Tensions in Aqueous Solutions of Alcohols, *The Journal of Physical Chemistry B* 2020, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c05412. Índice de impacto en el año de publicación: 2.991
5. E. Cea-Klapp, J.M. Míguez, P. Gómez-Álvarez, F. J. Blas, H. Quinteros-Lama, J.M. Garrido, Molecular modelling techniques for predicting liquid-liquid interfacial properties of methanol plus alkane (n-hexane,n-heptane,n-octane) mixtures, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2020, DOI: 10.1039/d0cp04823b. Índice de impacto en el año de publicación: 3.676
6. E. Fera, J. Algaba, J.M. Míguez, A. Mejía, P. Gómez-Álvarez, F. J. Blas, Vapour-liquid phase equilibria and interfacial properties of fatty acids methyl esters from molecular dynamics simulations, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2020, DOI: 10.1039/C9CP06397H. Índice de impacto en el año de publicación: 3.676
7. P. Prslja, E. Lomba, P. Gómez-Álvarez, T. Irbic, E.G. Noya, Adsorption of water, methanol and their mixtures in slit graphite pores, *J. Chem. Phys.* 2019, 150, 024705. Índice de impacto en el año de publicación: 2.991
8. A. Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, R. M. Madero-Castro, P. Gómez-Álvarez,* and S. Calero, Acetylene Storage and Separation Using Metal-Organic Frameworks with Open Metal Sites, *Applied Materials & Interfaces* 2019, 11, 311499-31507. Índice de impacto en el año de publicación: 8.758
9. P. Gómez-Álvarez, E.G. Noya, E. Lomba, S. Valencia, J. Pires, Study of Short-Chain Alcohol and Alcohol-Water Adsorption in MEL and MFI Zeolites, *Langmuir* 2018, 24, 12739-12750. Índice de impacto en el año de publicación: 3.789
10. J.M. Míguez, P. Gómez-Álvarez, M. M. Piñeiro, B. Mendiboure, F. J. Blas, Adsorption and interfacial phenomena of a Lennard-Jones fluid adsorbed in slit pore: DFT and GCMC simulations, *Mol. Phys.*, 2018, 116. Índice de impacto en el año de publicación: 1.704
11. A. Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, A. Poursaeidesfahani, T. J. H. Vlugt, R. Sanchez-de-Armas, P. Gómez-Álvarez*, S. Calero, Improving Olefin Purification using Metal Organic Frameworks with Open Metal Sites, *ACS applied materials & interfaces* 2018, 10, 16911-16917. Índice de impacto en el año de publicación: 7.504
12. A. Luna-Triguero, P. Gómez-Álvarez,* and S. Calero, Adsorptive process design for separation of hexane isomers using zeolites, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2017, 19, 5037-5042. Índice de impacto en el año de publicación: 4.449

13. A. Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, T. M. Becker, T. J. H. Vlught, D. Dubbeldam, P. Gómez-Álvarez,* and S. Calero, Effective model for Olefin/Paraffin Separation using (Co, Fe, Mn, Ni) -MOF-74, *ChemistrySelect* 2017, 2, 665–672. Índice de impacto en el año de publicación: -
14. P. Gómez-Álvarez, A. R. Ruiz-Salvador, S. Hamad, S. Calero, Importance of Blocking Inaccessible Voids on Modeling Zeolite Adsorption: Revisited, *The Journal of Physical Chemistry C* 2017, 121, 4462–4470. Índice de impacto en el año de publicación: 4.509
15. A. Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, P. Gómez-Álvarez*, and S. Calero, Olefin/Paraffin Separation in open-metal site Cu-BTC Metal-Organic Framework, *The Journal of Physical Chemistry C* 2017, 121, 3126–3132. Índice de impacto en el año de publicación: 4.509
16. R. Bueno-Perez, P. J. Merkling, P. Gómez-Álvarez, and S. Calero, Cd-BINOL Metal-Organic Framework for the Separation of Alcohol Isomers, *Chemistry –A European Journal* 2017, 23, 874–885. Índice de impacto en el año de publicación: 5.771
17. P. Gómez-Álvarez and S. Calero, Highly selective zeolite topologies for flue gas separation, *Chemistry –A European Journal* 2016, 22, 18705–18708 (Comunicación). Índice de impacto en el año de publicación: 5.771
18. P. Gómez-Álvarez, J. Perez-Carbajo, Salvador R. G. Balestra, and S. Calero, Impact of the Nature of the Exchangeable Cations on LTA-Type Zeolite Hydration, *The Journal of Physical Chemistry C* 2016, 120, 23254–23261. Índice de impacto en el año de publicación: 4.509
19. J. M. Vicent-Luna, D. Dubbeldam, P. Gómez-Álvarez,* and S. Calero, Microscopic assembly of aqueous solutions of Ionic Liquids, *ChemPhysChem* 2016, 17, 380-386 (Portada interior). Índice de impacto en el año de publicación: 3.419
20. P. Gómez-Álvarez*, S. Hamad, M. Haranczyk, A. Rabdel Ruiz-Salvador, and S. Calero, Comparing gas separation performance between all known zeolites and their Zeolitic Imidazolate Framework counterparts, *Dalton Transactions* 2016, 45, 216-225. Índice de impacto en el año de publicación: 4.197
21. S. Calero and P. Gómez-Álvarez,* Underlying Adsorption Mechanisms of Water in Hydrophobic and Hydrophilic Zeolite Imidazolate Frameworks: ZIF-71 and ZIF-90, *The Journal of Physical Chemistry C* 2015, 119, 23774-23780. Índice de impacto en el año de publicación: 4.772
22. S. Calero and P. Gómez-Álvarez,* On the performance of FAU and MFI zeolites for the adsorptive removal of a series of Volatile Organic Compounds from air using molecular simulation, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2015, 17, 26451-26455. Índice de impacto en el año de publicación: 4.493
23. A. Luna-Triguero, J. M. Vicent-Luna, D. Dubbeldam, P. Gómez-Álvarez* and S. Calero, Understanding and Exploiting Window Effects for Adsorption and Separations of Hydrocarbons, *The Journal of Physical Chemistry C* 2015, 119, 19236 – 19243. Índice de impacto en el año de publicación: 4.772
24. S. Calero and P. Gómez-Álvarez,* Insights into the Adsorption of Water and Small Alcohols on the Open-Metal Sites of Cu–BTC via Molecular Simulation, *The Journal of Physical Chemistry C* 2015, 119, 467 – 472. Índice de impacto en el año de publicación: 4.835
25. P. Gómez-Álvarez and S. Calero, Insights into the microscopic behaviour of nanoconfined water: host structure and thermal effects, *CrystEngComm*. 2015, 17, 412 – 421. Índice de impacto en el año de publicación: 4.034
26. R. Bueno-Pérez, A. Martín-Calvo, P. Gómez-Álvarez, J. J. Gutiérrez-Sevillano, P. J. Merkling, T. J. H. Vlught, T. S. van Erp, D. Dubbeldam, S. Calero. Enantioselective adsorption of ibuprofen and lysine in metal–organic frameworks, *Chemical Communications* 2014, 50, 10849 – 10852. Índice de impacto en el año de publicación: 6.834
27. S. Calero and P. Gómez-Álvarez,* Hydrogen bonding of water confined in zeolites and their zeolitic imidazolate framework counterparts, *RSC Advances* 2014, 4, 29571- 29580. Índice de impacto en el año de publicación: 3.840
28. S. Calero and P. Gómez-Álvarez,* Effect of the confinement and presence of cations on hydrogen bonding of water in LTA-type zeolite, *The Journal of Physical Chemistry C* 2014, 118, 9056 – 9065. Índice de impacto en el año de publicación: 3.835

29. J. Pérez-Carbajo, P. Gómez-Álvarez, R. Bueno-Pérez, P. J. Merkling, S. Calero, Optimisation of the Fischer-Tropsch process using zeolites for tail gas separation, *Physical Chemistry Chemical Physics* 2014, 16, 5678 – 5688. Índice de impacto en el año de publicación: 4.198
30. P. Gómez-Álvarez, D. González-Salgado, J-P Bazile, D. Bessieres, F. Plantier, Excess second-order thermodynamic derivatives of the {2-propanol + water} system from 313.15 K to 403.15 K up to 140 MPa. Experimental and Monte Carlo simulation study, *Fluid Phase Equilibria* 2013, 358, 7 – 26. Índice de impacto en el año de publicación: 2.379
31. P. Gómez-Álvarez, L. Romaní, D. González-Salgado, Association effects in the {methanol + inert solvent} system via Monte Carlo simulations. I. Structure, *The Journal of Chemical Physics* 2013, 138, 204505. Índice de impacto en el año de publicación: 3.164
32. P. Gómez-Álvarez, L. Romaní, D. González-Salgado, Association effects in the {methanol + inert solvent} system via Monte Carlo simulations. II. Thermodynamics, *The Journal of Chemical Physics* 2013, 138, 204506. Índice de impacto en el año de publicación: 3.164
33. P. Gómez-Álvarez, L. Romaní, D. González-Salgado, Association effects in pure methanol via Monte Carlo simulations. I. Structure, *The Journal of Chemical Physics* 2013, 138, 044509. Índice de impacto en el año de publicación: 3.164
34. P. Gómez-Álvarez, L. Romaní, D. González-Salgado, Association effects in pure methanol via Monte Carlo simulations. II. Thermodynamics, *The Journal of Chemical Physics* 2013, 138, 044510. Índice de impacto en el año de publicación: 3.164
35. D. González-Salgado, A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, J. M. Míguez-Díaz, C. Vega, Solid-Solid and Solid-Fluid Equilibria of the Most Popular Models of Methanol Obtained by Computer Simulation, *The Journal of Physical Chemistry B* 2011, 115, 3522 – 3530. Índice de impacto en el año de publicación: 3.696
36. P. Gómez-Álvarez, A. Dopazo-Paz, L. Romaní, D. González-Salgado, A simple methodology for analyzing association effects on response functions via Monte Carlo simulations, *The Journal of Chemical Physics* 2011, 134, 014512. Índice de impacto en el año de publicación: 3.333
37. A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, D. González-Salgado, Thermodynamics and structure of the {water +methanol} system viewed from three simple additive pair wise intermolecular potential based on the rigid molecule approximation, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* 2010, 75, 617 – 635. Índice de impacto en el año de publicación: 0.856

C.2. Congresos

- 8 comunicaciones orales en congresos internacionales
- 6 comunicaciones orales en congresos nacionales
- 22 contribuciones tipo póster en congresos nacionales e internacionales

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- Contratos adscritos a proyectos:
 - Contrato postdoctoral en el IQFR-CSIC en el marco del proyecto *Teoría y simulación de sistemas complejos* (01/01/2017-22/09/2017).
 - Contrato de Titulado Superior de Apoyo a la Investigación con grado de Doctor (01/01/2013-31/12/2016) en la Universidad Pablo de Olavide adscrito al proyecto de investigación *Towards more efficient materials for technological processes* al amparo de la Ayuda *ERC Starting Independent Researcher Grant*.
- Participación en numerosos proyectos de I+D+i del Plan Nacional y Autonómico