

**CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)**

|                      |            |
|----------------------|------------|
| <b>Fecha del CVA</b> | 01/04/2025 |
|----------------------|------------|

**Parte A. DATOS PERSONALES**

|  |                     |  |  |
|--|---------------------|--|--|
| Nombre   | Sheila              |  |  |
| Apellidos                                      | López Rosa          |  |  |
| Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*) | 0000-0002-7667-8462 |  |  |

**A.1. Situación profesional actual**

|                        |  |  |  |
|------------------------|--|--|--|
| Puesto                 | Profesora Titular de Universidad   |  |  |
| Fecha inicio           | 25/02/2020   |  |  |
| Organismo/ Institución | Universidad de Sevilla   |  |  |
| Departamento/ Centro   | Dpto de Física Aplicada II (E.T.S. Ingeniería de Edificación)  |  |  |
| País                   | España   |  |  |
| Palabras clave         | Teoría de Información. Física Atómica y Molecular. Complejidad. Divergencias. Entropía. Entanglement |  |  |

**A.2. Situación profesional anterior**

| Periodo               | Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción                   |
|-----------------------|---|
| 20/01/2016-24/02/2020 | Profesora Contratada Doctora/Universidad de Sevilla/España        |
| 21/10/2012-19/01/2016 | Profesora Ayudante Doctora/Universidad de Sevilla/España          |
| 21/10/2011-20/10/2012 | Profesora Ayudante/Universidad de Sevilla/ España                 |
| 01/01/2011-20/10/2011 | Contrato postdoctoral (Plan Propio)/Universidad de Granada/España |
| 01/10/2008-30/09/2010 | Contratada de Predoctoral FPU/Universidad de Granada/España       |
| 01/10/2006-30/09/2008 | Becaria de Predoctoral FPU/Universidad de Granada/España          |

**A.3. Formación Académica**

| Grado/Master/Tesis            | Universidad/País       | Año  |
|-------------------------------|------------------------|------|
| Licenciada Física             | Universidad de Granada | 2005 |
| Máster en Física y Matemática | Universidad de Granada | 2007 |
| Doctora en Física             | Universidad de Granada | 2010 |

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica**

- Número de sexenios de investigación reconocidos: 3 (último concedido 2018-2023).
- Número de citas recibidas (WOS): 846.
- Índice h: 18
- Trabajos Fin de Máster dirigidos: 1
- Tesis doctorales dirigidas: 1
- Publicaciones en revistas indexadas: 42. En el primer cuartil (Q1): 16. Por terciles: T1:22, T2:18



## **Parte B. RESUMEN DEL CV (máx. 5.000 caracteres, incluyendo espacios):**

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. Desde 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: 43 publicaciones en revistas indexadas (en 13 de ellas como primer autor. En JCR: 15 de ellas en el primer cuartil), 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. Mi índice es: 16 (Wos), 17 (Scopus) He participado en 16 proyectos de investigación: 7 de ámbito nacional, 8 de ámbito autonómico y 1 dentro Campus de Excelencia Internacional CEI BioTIC GENIL del MICINN, del cual he sido la investigadora principal. He codirigido 1 tesis doctoral (defendida en 2018 con calificación Sobresaliente Cum Laude por Unanimidad) y 1 Trabajo Fin de Máster (2014). Pertenezco al Instituto Interuniversitario 'Carlos I' de Física Teórica y Computacional de las Universidades de Granada, Sevilla, Almería y Málaga desde 2005, y a la Real Sociedad Española de Física y a su Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular desde 2010 (en la cual, desde junio de 2024 formo parte de la Sección Local de Sevilla como Vocal).

## **Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES**

### **C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con "peer review" y conferencias.**

- 1) I. López-García, J.C. Angulo, S. López-Rosa. Similarity among quantum-mechanical states: analysis and applications for central potentials. *Journal of Physics A* 57 (2024) 495209.
- 2) R.O. Esquivel, M. Molina-Espíritu, S. López-Rosa. 3D Information-Theoretic Analysis of the Simplest Hydrogen Abstraction Reaction. *Journal of Physical Chemistry A* 127 (2023) 6159.
- 3) I. López-García, A.J. Macías, S. López-Rosa, J.C. Angulo. Information-theoretical analysis of Dirac and nonrelativistic quantum oscillators. *Physical Review A* 108 (2023) 022812.

- 4) J.C. Angulo, S. López Rosa. Mutual information in conjugated spaces for neutral atoms and ions. *Entropy* 24 (2022) 233.
- 5) S. López-Rosa, J.C. Angulo, A.L. Martín, J. Antolín. Analysis of correlation and ionization from pair distributions in many-electron systems. *European Physical Journal Plus* 136 (2021) 763.
- 6) 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.
- 7) S. López-Rosa, Z.P. Xu; A. Cabello. Maximum nonlocality in the (3,2,2) scenario. *Physical Review A*. 94 (2016) 062121.
- 8) 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.
- 9) 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.
- 10) 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.

## C.2. Congresos

- 1) *Information-theoretical analysis of Dirac and non-relativistic quantum oscillators*. 54th Conference of the European Group on Atomic Systems (EGAS54). Strasbourg, Francia. Fecha: 18-22/06/2023
- 2) *Information-theoretic quantifiers of electron correlation in atomic systems*. Quantum Cagliari 2018: Quantum Structures & Quantum Information Theory Cagliari, Italia. Ponencia invitada. Fecha: 08/10/2018
- 3) *Cuantificando efectos relativistas en sistemas atómicos mediante medidas de similitud cuántica generalizadas*. IX Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM2017). Comunicación oral. Fecha: 22-24/03/2017.
- 4) *Cálculo de divergencias en sistemas moleculares*. VIII Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM2016). Comunicación oral. 24-26/02/2016
- 5) *Information-theoretic analysis of biological molecules*. 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2014). 05-10/10/2014.
- 6) *Quantum entanglement of He isoelectronic series*. XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2013). 09-11/09/2013.
- 7) *Entropy and complexity properties of Rydberg atoms*. The 39th International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL2013). 30/06-05/07/2013.
- 8) *Quantifying Dirac hydrogenic effects via complexity measures*. The 39th International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL2013). 30/06-05/07/2013.
- 9) *Relativistic effects via LMC and Fisher-Shannon complexity measures*. IV Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM2012). Comunicación oral. 01-03/02/2012

10) Jensen-Tsallis divergence and atomic dissimilarity for neutral and ionized systems in conjugated spaces. Summer School on Quantum Matter: Foundations and New Trends (MUARC & MPAGs).18-21/09/2011

### **C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado**

1) *Sistemas híbridos: aspectos cuánticos y clásicos (PID2020-113390GB-I00)*. IP: María Rosario González Férrez (UGR). Nombre del programa: Convocatoria 2020 - Proyectos de I+D+i (Junta de Andalucía). Duración: 01/09/2021 - 30/08/2024.

2) *Nuevas herramientas en información y comunicación cuánticas (PID2020-113738GB-I00)*. IP: Adán Cabello Quintero. Programa financiador: Plan Estatal 2017-2020 Generación Conocimiento - Proyectos I+D+i (Ministerio de Economía y Competitividad) Duración: 01/09/2021 - 31/08/2025.

3) *Desorden en sistemas físicos: complejidad, interacciones y no-linealidad (P20\_00082)*. IP: María Rosario González Férrez (UGR). Programa financiador: Proyectos de I+D+i. Universidades y entidades públicas de investigación (Ministerio de Ciencia e Innovación Tipo de entidad: Agencia Estatal). Duración: 04/10/2021 - 30/06/2023.

4) *Información, complejidad y no-linealidad. Aplicaciones multidisciplinares (A-FQM-52-UGR20)*. IP: María Rosario González Férrez (UGR). Programa financiador: FEDER-Universidad de Granada (Universidad de Granada). Duración: 01/07/2021 - 30/06/2023.

5) *Comunicación cuántica segura basada en entrelazamiento energy-time/time-bin (PCI2019-111885-2)*. IP: Adán Cabello Quintero (US). Programa financiador: Plan Estatal 2017-2020 Retos - Programación Conjunta Internacional (Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades). Duración: 01/01/2020-31/12/2022.

6) *Herramientas Cuánticas para Información, Computación e Investigación (FIS2017-89609-P)*. IP: Adán Cabello Quintero (US). Programa financiador: Plan Estatal 2013-2016 Excelencia - Proyectos I+D (Ministerio de Economía y Competitividad) Duración: 01/01/2018-31/12/2020.

7) *Información cuántica avanzada (FIS2014-60843P)*. IP: Adán Cabello Quintero (US). Programa financiador: Plan Estatal 2013-2016 Excelencia - Proyectos I+D (Ministerio de Economía y Competitividad). Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 31/12/2017.

8) *Información y complejidad en sistemas multielectrónicos. Aplicaciones físicas, biotecnológicas y farmacológicas (FIS2014-59311P)*. IP: Juan Carlos Angulo Ibáñez (UGR). Programa financiador: Ministerio de Economía y Competitividad (Ministerio de Economía y Competitividad). Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 31/12/2017.

### **C.4. 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.5. 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.