

**Parte A. DATOS PERSONALES****Fecha del CVA**

25/06/2025

Nombre y apellidos	Felipe Jiménez Blas		
DNI/NIE/pasaporte		Edad	
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	L-3762-2014	
	Código Orcid	0000-0001-9030-040X	

A.1. Situación profesional actual

Organismo	Universidad de Huelva		
Dpto./Centro	Departamento de Ciencias Integradas		
Dirección	Facultad de Ciencias Experimentales, Campus de El Carmen, 20171 Huelva		
Teléfono		Correo electrónico	
Categoría profesional	Catedrático de Universidad	Fecha inicio	19/10/2017
Espec. cód. UNESCO	2206,2210,2213		
Palabras clave	Mecánica Estadística, Simulación molecular, Monte Carlo, Dinámica Molecular, Fluidos complejos, Interfases, clatratos hidratos		

A.2. Situaciones profesionales anteriores

Periodo	Posición/Institución/País
1995-1996	Est. doctorado (Beca URV, Universitat Rovira i Virgili)
1996-1998	Est. doctorado (Beca FPU/CIRIT, Generalitat Catalunya)
1998-2004	Profesor Ayudante Doctor LRU
2000-2001	Postdoctoral Research Associate, Imperial College London
2004-2017	Profesor Titular

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

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Física	Universidad de Sevilla	1992
Doctor Ingeniero Químico	Universitat Rovira i Virgili	2000

Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM

Felipe J. Blas obtuvo la Licenciatura en Física (Universidad de Sevilla, 1992) y el Doctorado en Ingeniería Química (Universidad Rovira i Virgili, 2000, Premio Extraordinario de Doctorado) bajo la dirección de la Dra. Lourdes F. Vega. Como investigador postdoctoral, se incorporó al grupo del Prof. George Jackson en el Departamento de Ingeniería Química del Imperial College London (Reino Unido, 2000 y 2001). Inició su carrera como Profesor Ayudante en la Universidad de Huelva (España). El Dr. Blas ha realizado varias estancias predoctorales (Universidad de Cornell, 1996 y 1997) y postdoctorales (Instituto Superior Técnico de Lisboa y Laboratorio de Fluidos Complejos de la Universidad de Pau – CNRS, Francia). A finales de 2009, pasó a ser investigador principal de su grupo de investigación en Huelva. En 2017, recibió el Premio AIQBE 2016 en el Área Científico-Técnica, correspondiente al galardón de la Cátedra AIQBE 2016 (Asociación de Industrias Químicas, Básicas y Energéticas de Huelva) de la Universidad de Huelva, en reconocimiento a su actividad investigadora en dicha área. Ha sido promocionado en varias ocasiones: Profesor Titular de Física Aplicada (2004) y acreditación de Catedrático por ANECA (2013), hasta alcanzar su puesto actual como Catedrático de Física Aplicada (2017). Es experto en la aplicación, desarrollo y extensión de teorías de la Termodinámica Estadística para la predicción de propiedades termodinámicas y equilibrios de fases en mezclas complejas de interés industrial. Tiene amplia experiencia en el uso y desarrollo de funcionales de densidad y teorías de gradiente de densidad, basadas en teorías de perturbaciones, para la predicción de propiedades interfaciales de mezclas complejas, incluyendo hidrocarburos, agua, aminas, CO₂, etc. Ha desarrollado y aplicado métodos de simulación Monte Carlo y Dinámica Molecular durante los últimos quince años para determinar propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas, así como equilibrios de fases y propiedades interfaciales de sistemas complejos. En el último año, ha orientado su investigación al estudio de equilibrios de fases, energías libres interfaciales y nucleación homogénea de hidratos tipo clatrato de gases naturales, como CO₂, CH₄ y THF. El Dr. Blas es coautor de más de 100 artículos en revistas internacionales indexadas en JCR, con cerca del 90 % de los trabajos en el cuartil

Q1, y ha presentado más de 150 contribuciones en congresos científicos nacionales e internacionales, incluyendo conferencias invitadas en la Royal Society of Chemistry, Congresos IUPAC de Termodinámica Química y Simposios de Propiedades Termofísicas en Boulder (EE. UU.). Ha participado en más de 30 proyectos de investigación y contratos con la industria, tanto como investigador participante como investigador principal. Ha colaborado en 6 contratos con la industria: dos en Reino Unido y cuatro en España (Huelva).

El Dr. Blas colabora con numerosos grupos de investigación (Universidad Complutense, Universidad de Vigo, CSIC, Imperial College London, Universidad Técnica de Lisboa, Universidad de Pau et des Pays de l'Adour, Universidad de Vanderbilt - EE.UU., y Universidad de Concepción - Chile). Muchos de estos colaboradores forman parte de la **Red Española de Simulación Molecular**, la cual él coordina desde su creación en 2011. Esta red ha sido financiada por cuatro proyectos distintos de Redes de Excelencia del Gobierno de España.

Desde 2018, es Coordinador y Director del **Máster Oficial en Simulación Molecular** de la Universidad de Huelva y la Universidad Internacional de Andalucía.

Indicadores generales:

- 4 sexenios (1996-2001, 2002-2007, 2008-2013, 2014-2019).
- 5 quinquenios (1996-2000, 2001-2005, 2006-2010, 2011-2015, 2016-2020).
- 4 Tesis doctorales supervisadas en 10 años (+ 3 tesis en curso).
- ~5100 citas en Google Scholar (GS).
- Promedio de citas en los últimos cinco años: ~300/año (GS).
- Promedio citas/publicaciones: ~50 citas (GS).
- Índice h =39 (GS).
- Publicaciones internacionales totales: ~100. Publicaciones en Q1: 86 (88%).
- 13 publicaciones con más de 100 citas (1 con 500 and 2 con más de 300).

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

C.1. Publicaciones

- N. Di Pasquale, J. Algaba, P. Montero de Hijes, I. Sanchez-Burgos, A. R. Tejedor, S. R. Yeandel, F. J. Blas, R. L. Davidchack, J. R. Espinosa, C. L. Freeman, J. H. Harding, B. B. Laird, E. Sanz, C. Vega y L. Rovigatti, **Solid-Liquid Interfacial Free Energy from Computer Simulations: Challenges and Recent Advances**, Chem. Rev. 125, 5003 (2025).
- A. Borrero, A. Díaz-Costa, S. Blazquez, I. M. Zerón, J. Algaba, M. M. Conde y F. J. Blas, **Three-Phase Equilibria of CO₂ Hydrate from Computer Simulation in the Presence of NaCl**, Energy & Fuels 39, 5522 (2025).
- I. M. Zerón, J. Algaba, J. M. Míguez, J. Grabowska, S. Blazquez, E. Sanz, C. Vega y F. J. Blas, **Homogeneous nucleation rate of carbon dioxide hydrate formation under experimental condition from Seeding simulations**, J. Chem. Phys. 162, 134708 (2025).
- I. M. Zerón, J. Algaba, J. M. Míguez, B. Mendiboure, and F. J. Blas, **Rotationally invariant local bond order parameters for accurate determination of hydrate structures**, Mol. Phys. e2395438 (2024).
- M. J. Torrejón, C. Romero-Guzmán, M. M. Piñeiro, F. J. Blas, and J. Algaba, **Simulation of the THF hydrate–water interfacial free energy from computer simulation**, J. Chem. Phys. 161, 064701 (2024).
- M.J. Torrejón, J. Algaba, and F. J. Blas, **Dissociation line and driving force for nucleation of the nitrogen hydrate from computer simulation. II. Effect of multiple occupancy**, J. Chem. Phys. 161, 054712 (2024).
- J. Algaba, S. Blazquez, J. M. Míguez, M. M. Conde, and F. J. Blas, **Three-phase equilibria of hydrates from computer simulation. III. Effect of dispersive interactions in the methane and carbon dioxide hydrate**, J. Chem. Phys. 160, 164723 (2024).
- J. Algaba, S. Blazquez, E. Fera, J. M. Míguez, M. M. Conde, and F. J. Blas, **Three-phase equilibria of hydrates from computer simulation. II. Finite-size effects in the carbon dioxide hydrate**, J. Chem. Phys. 160, 164722 (2024).
- S. Blazquez, J. Algaba, J. M. Míguez, C. Vega, F. J. Blas, and M. M. Conde, **Three-phase equilibria of hydrates from computer simulation. I. Finite-size effects in the methane hydrate**, J. Chem. Phys. 160, 164721 (2024).

- J. Algaba, C. Romero-Guzmán, M. J. Torrejón, and F. J. Blas, **Prediction of the univariant two-phase coexistence line of the tetrahydrofuran hydrate from computer simulation**, J. Chem. Phys. **160**, 164718 (2024).
- A. R. Tejedor, I. Sanchez-Burgos, E. Sanz, C. Vega, F. J. Blas, R. L. Davidchack, N. Di Pasquale, J. Ramirez, and J. R. Espinosa, **Mold: a LAMMPS package to compute interfacial free energies and nucleation rates**, Journal of Open Source Software **9**, 6083 (2024).
- I. M. Zerón, M. Cueto Mora, and F. J. Blas, **Transport properties of the square-well fluid from molecular dynamics simulation**, Mol. Phys. e2302385 (2024).

C.2. Proyectos

- Title: **Entendiendo la nucleación de hidratos de hidrógeno desde una perspectiva molecular (NUCLEA-H2) (EPIT-1282023)**

Entidad financiadora: Programa Operativo FEDER Andalucía 2021-2027 – Univ. de Huelva
Dates, since: 25-05-2024 until: 24-05-2027. Funding: 73,100 €. Tipo de participación: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Equilibrio de fase, nucleación y propiedades dinámicas de hidratos y clatratos mediante técnicas avanzadas de simulación molecular (PDI-2021-125081NB-I00)**. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Duración, desde: 01-09-2022 hasta: 30-08-2025. Cuantía de la subvención: 90,750 € + 1 FPI contract. Tipo de participación: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Equilibrio de fase de hidratos de metano y dióxido de carbono en presencia de promotores termodinámicos y cinéticos (UHU-202034)**

Entidad financiadora: Programa Operativo FEDER Andalucía 2014-2020 – Univ. de Huelva
Duración, desde: 01-01-2022 hasta: 30-06-2023. Cuantía de la subvención: 40,000 €. Tipo de participación: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Nucleación de hidratos de metano y dióxido de carbono (P20-00363)**. Entidad financiadora: Junta de Andalucía. Duración, desde: 23-06-2020 hasta: 31-12-2022. Cuantía de la subvención: 73,650 €. Type of participation: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Estudio de los parámetros termodinámicos y cinéticos en la transición sólido-líquido de clatratos, hidratos de metano y dióxido de carbono (UHU-1255522)**. Entidad financiadora: Programa Operativo FEDER Andalucía 2014-2020 – Univ. de Huelva. Duración, desde: 01-01-2020 until: 31-12-2022. Cuantía de la subvención: 39,797 €. Tipo de participación: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Red de Simulación Molecular (RED2022-134276-T)**

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Duración, desde: 01-06-2023 hasta: 31-08-2025. Cuantía de la subvención: 20,300 €. Tipo de participación: Investigador.

- Título del proyecto: **Red de Simulación Molecular (RED2018-102593-T)**

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Duración, desde: 01-01-2020 hasta: 31-12-2022. Cuantía de la subvención: 15,000 €. Tipo de participación: Investigador Principal.

- Título del proyecto: **Autoensamblado y sistemas estructurados en redes (FIS2017-89361-C3-1-P)**. Entidad financiadora: Ministerio de Economía, Industria y Competitividad. Duración, desde: 01-01-2018 hasta: 31-12-2020. Cuantía de la subvención: 54,450 €. Tipo de participación: Investigador Principal del Proyecto Coordinado y del subproyecto de la Universidad de Huelva

- Título del proyecto: **Red de Simulación Molecular (FIS2015-71749-REDT)**. Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitiva. Duración, desde: 01-12-2015 hasta: 01-12-2018. Cuantía de la subvención: 30,000 €. Tipo de participación: Investigador Principal

- Título del proyecto: **Fluctuaciones en interfases: campos externos y gradientes de composición (FIS2013-46920-C2-1-P)**. Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitiva. Duración, desde: 01-01-2014 hasta: 31-12-2017. Cuantía de la subvención: 30,000 €. Tipo de participación: Investigador Principal

- Título del proyecto: **Red de Simulación Molecular (RdSiMol) (FIS2011-13119-E)**. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, Subprograma de Acciones Complementarias. Duración, desde: 01-01-2012 hasta: 30-06-2013. Cuantía de la subvención: 15,000 €. Tipo de participación: Investigador Principal

- Título del proyecto: **Teoría y simulación de propiedades interfaciales y equilibrio de fases de fluidos complejos (FIS2010-14866)**. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Duración, desde: 01-01-2011 hasta: 31-12-2014. Cuantía de la subvención: 43,560 €. Tipo de participación: Investigador Principal

C.3. Contratos, méritos tecnológicos o de transferencia

- **Modelling of interfaces and phases of water-oil-surfactant systems in squeeze treatments of oil fields (GR/N20317/01)**

Empresa/Administración financiadora: EPSRC and BP Exploration Ltd Duración, desde: Julio 2001 hasta: Octubre 2002

Cuantía del proyecto: 137,809€

Tipo de participación: Investigador

- **Estudio de los factores físico-químicos que controlan las pérdidas de Cu en los procesos de fusión flash (Ref. 10/2014)**

Empresa/Administración financiadora: Atlantic Copper SLU

Duración, desde: Enero 2014 hasta: Noviembre 2014

Cuantía del proyecto: 35,000€

Tipo de participación: Investigador

- **Estudio de los factores físico-químicos que controlan las pérdidas de Cu en los procesos de fusión flash. Segundo año (Ref. 7/2015)**

Empresa/Administración financiadora: Atlantic Copper SLU

Duración, desde: Noviembre 2014 hasta: Febrero 2016

Cuantía del proyecto: 84,715€

Tipo de participación: Investigador

- **Estudio físico-químico de las escorias y mata de los hornos flash y eléctrico enfocado al análisis de las pérdidas de cobre (Ref. 29/2016)**

Empresa/Administración financiadora: Atlantic Copper SLU

Duración, desde: Junio 2016 hasta: Enero 2018

Cuantía del proyecto: 91,900€

Tipo de participación: Investigador

C.6, C.7... Otros

- Premio Extraordinario de doctorado de la Universitat Rovira i Virgili. Curso 2000-2001.

- Premio AIQBE de Investigación del Área Científico Tecnológica 2016, Cátedra AIQBE (Asociación de Industrias Químicas, Básicas y Energéticas) de la Universidad de Huelva.

- Vicerrector de Investigación y Transferencia de la Universidad de Huelva (13/11/2015 - 31/03/2016).

- Director del Departamento de Ciencias Integradas (Física, Matemáticas y Biología) de la Universidad de Huelva (03/07/2020-08/10/2021).

- Miembro del *Editorial Advisory Board* de la revista **Journal of Chemical and Engineering Data (American Chemical Society)** (2015-2019, ambos inclusive).

- Evaluador de: (1) ANEP (Áreas ANEP: Física y Ciencias del Espacio y Ciencia y Tecnología de los Materiales). (2) Agencia Andaluza de Evaluación de la Calidad y Acreditación Univeritaria (AGAE). (3) Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR).

- Coordinador Nacional de la Red Española de Simulación Molecular (desde 2011). Organizador de 3 Escuelas y 10 Workshops Nacionales de la Red Española de Simulación Molecular.

- Organizador de **VI Reunión Nacional de Física Estadística (FISES'09)** de la RSEF (septiembre 2009).

- Organizador del **XV Encuentro Inter-Bienal del Grupo Especializado de Termodinámica (GET)** de las RSEF y ESQE, Huelva (septiembre 2016).

- Organizador y Chairman del Congreso Internacional **26th Bienal Thermodynamics Conference, Thermodynamics'2019** de la Royal Society of Chemistry (Punta Umbría, Huelva, 26-28 de junio de 2019).

- Guest Editor de los Special Issues Thermodynamics'2019 y Thermodynamics'2020 de **Molecular Physics** (2020 y 2023).