



Jon Mattin Matxain Beraza

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 15/06/2020

v 1.4.0

3a878204fedca2ef80c57aa94e829dff

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

I obtained my Chemistry Degree in 1998, at the University of the Basque Country. During this period, I stayed at Utrecht University as Erasmus Student, hosted in the Theoretical Chemistry Group, led by Prof. Dr. Frans B. van Duijneveldt, where I studied Quantum Chemistry. After that, I began my Ph.D. Thesis under the supervision of Prof. Jesus M. Ugalde, at the University of the Basque Country, in the field of Theoretical Chemistry. During my Ph.D. period (1998-2002), I spent three months in the Cavendish Laboratory, at the University of Cambridge, under the supervision of Prof. Richard Needs. Finally, in 2002, I defended my Thesis entitled "Small Clusters of II-VI Materials", obtaining the maximum degree as International Thesis, and the Extraordinary Prize of Doctorate.

During 2005 and 2006 I moved to Sweden, to the University of Örebro. I carried out a Postdoctoral Stay of two years under the supervision of Prof. Leif A. Eriksson, leader of the Theoretical Biophysics Group. During this time I started my research in the field of Biochemistry, and continued with my research in the field of Nanoscience. In 2009 I got a Ramón y Cajal Fellowship, and I reincorporated in the Theoretical Chemistry Group at the University of the Basque Country. During the period of 2009-2014 I continued with my work in the fields of biochemistry and nanoscience. Since 2016 I have a Permanent Research Position at the University of the Basque Country (UPV/EHU). In addition to Biochemistry and Nanoscience, I am also interested on Polymeric Materials. Summarizing, my research interests deal with a) Biochemistry; b) Nanoscience; c) Polymers, and any combination of them.

Since I began my career around 20 years ago, I have published 85 scientific papers, 1 book and 2 book chapters. I am Guest Editor in the journal "Polymers", editing the Special Issue "Dynamic Chemistry in Polymer Science". Taking into account all these publications, my h-index is of 25 according to WOS, and 26 according to Scopus, which leads to a m factor of 1.3. Regarding Research Projects, I have been involved in around 25 Funded regional, national and European Research Projects, leading 3 of them. In addition, I have participated in closely 50 conferences, giving roughly 20 invited conferences. I have visited other Research Institutions where I was invited to give invited seminars. Due to all this research activity, I have been recognized with 3 research periods (1 period = 6 years).

Since 2010 I have been involved in Teaching as well. During this period, I have been teaching a number of subjects within Physical Chemistry area: a) Advanced Physical Chemistry (4 years);

**C****V****n**

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

3a878204fedca2ef80c57aa94e829dff

b) Experiments in Physical Chemistry (4 years); Physical Chemistry II (6 years), Physical Chemistry I (2 years). In addition, I supervise Undergraduate, Master and PhD students. In total, I have supervised 13 Final-Year-Works (+2 ongoing), 3 Master Thesis (+2 ongoing), and 2 Ph.D Thesis (+4 ongoing).

In addition to this teaching and research activities, I am also involved in the social dissemination of Science. I have a dissemination blog, and I often collaborate in two local radio programs. I also participate in events organized by the UPV/EHU, and other institutions such as DIPC, CFM etc, like Pint of Science, Science Week, and others. I closely collaborate with the Scientific Culture Chair of our University.



Indicadores generales de calidad de la producción científica

Descripción breve de los principales indicadores de calidad de la producción científica (sexenios de investigación, tesis doctorales dirigidas, citas totales, publicaciones en primer cuartil (Q1), índice h....). Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Total

Research Periods (1 period = 6 years): 3

Supervised PhD Thesis: 2

Supervised Master Thesis: 8

Supervised Final Year Works: 15

Indexed Publications: 94

Journals: 91

Books and Book Chapters: 3

Journal Editor: 1 ("Polymers", Special Issue: "Dynamic Chemistry in Polymer Science")

Q1 Publications: 65 (74%)

H index: 27 (WOS); 27 (Scopus)

Total Cites: 1897 (WOS); 2036 (Scopus)

Average Cites/Year (last 5 years): 157 (WOS); 161 (Scopus)

i50 Index: 9 (WOS); 10 (Scopus)

i10 Index: 57 (WOS); 56 (Scopus)



Jon Mattin Matxain Beraza

Apellidos: Matxain Beraza
Nombre: Jon Mattin
DNI: 44623825F
ORCID: 0000-0002-6342-0649
Fecha de nacimiento: 06/08/1975
Sexo: Hombre
Nacionalidad: España
País de nacimiento: España
C. Autón./Reg. de nacimiento: Comunidad Foral de Navarra
Provincia de contacto: Vizcaya
Ciudad de nacimiento: Iruñea / Pamplona
Dirección de contacto: San Antonio Kalea
Resto de dirección contacto: 8, 2. ezkerra
Código postal: 48901
País de contacto: España
C. Autón./Reg. de contacto: País Vasco
Ciudad de contacto: Barakaldo
Teléfono fijo: (+34) 943 01 53 41
Fax: (+34) 943 01 52 70
Correo electrónico: jonmattin.matxain@ehu.es
Teléfono móvil: (+34) 666235019
Página web personal: <http://kimikakuantikoa.blogspot.com.es/>

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad del País Vasco

Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros, Facultad de Ciencias Químicas

Categoría profesional: Personal Investigador Doctor Permanente

Fecha de inicio: 14/09/2016

Modalidad de contrato: Contrato laboral indefinido

Régimen de dedicación: Tiempo completo

Primaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad del País Vasco	Personal Investigador Doctor	13/01/2014
2	Universidad del País Vasco	Investigador Ramón y Cajal	01/01/2009
3	Universidad del País Vasco	Personal Investigador Contratado Doctor	03/03/2008
4	Universidad del País Vasco	Personal Investigador Contratado Doctor	01/01/2007
5	Universidad de Örebro	Investigador PostDoctoral	01/01/2005
6	Universidad del País Vasco	Investigador PostDoctoral	12/12/2002



- 1 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Personal Investigador Doctor
Fecha de inicio-fin: 13/01/2014 - 13/09/2016 **Duración:** 2 años - 9 meses
- 2 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2013 **Duración:** 5 años
- 3 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Personal Investigador Contratado Doctor
Fecha de inicio-fin: 03/03/2008 - 31/12/2008 **Duración:** 9 meses - 28 días
- 4 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Personal Investigador Contratado Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/01/2007 - 31/12/2007 **Duración:** 1 año
- 5 Entidad empleadora:** Universidad de Örebro **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Investigador PostDoctoral
Fecha de inicio-fin: 01/01/2005 - 31/12/2006 **Duración:** 2 años
- 6 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Investigador PostDoctoral
Fecha de inicio-fin: 12/12/2002 - 31/12/2004 **Duración:** 2 años - 17 días



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Titulado Superior

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas Especialidad Fundamental

Entidad de titulación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de titulación: 30/06/1998

Doctorados

Programa de doctorado: Materiales poliméricos (matpol)

Entidad de titulación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad titulación: País Vasco, España

Fecha de titulación: 04/07/2002

Entidad de titulación DEA: Universidad del País Vasco

Fecha de obtención DEA: 05/06/2000

Doctorado Europeo: Si

Fecha de mención: 09/09/2004

Título de la tesis: Small Clusters of II-VI Materials

Director/a de tesis: Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Calificación obtenida: Excellent Cum Laude

Mención de calidad: Si

Premio extraordinario doctor: Si

Fecha de obtención: 09/09/2004

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Español		C1	C1	C1	C1
Euskera		C1	C1	C1	C1
Inglés		C1	C1	C1	C1

Actividad docente



Formación académica impartida

- 1** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física I
Categoría profesional: Investigador Doctor Permanente
Tipo de programa: Grado **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 2
Fecha de inicio: 09/2018 **Fecha de finalización:** 07/2019
Fecha de finalización: 07/2019 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 4,5
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.9 **Calificación máxima posible:** 5.0
Idioma de la asignatura: Español
- 2** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física I
Categoría profesional: Investigador Doctor Permanente
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 2
Fecha de inicio: 09/2017 **Fecha de finalización:** 07/2018
Fecha de finalización: 07/2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 6
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.9 **Calificación máxima posible:** 5.0
Idioma de la asignatura: Español
- 3** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Doctor Permanente
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas



Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2017
Fecha de finalización: 07/2018
Nº de horas/créditos ECTS: 9
Entidad de realización: Universidad del País Vasco
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.6
Idioma de la asignatura: Euskera

Fecha de finalización: 07/2018
Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos
Tipo de entidad: Universidad
Calificación máxima posible: 5.0

4 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Doctor Permanente
Tipo de programa: Licenciatura
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2016
Fecha de finalización: 07/2017
Nº de horas/créditos ECTS: 9
Entidad de realización: Universidad del País Vasco
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.8
Idioma de la asignatura: Euskera

Tipo de docencia: Teórica presencial
Fecha de finalización: 07/2017
Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos
Tipo de entidad: Universidad
Calificación máxima posible: 5

5 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal / Personal Investigador Contratado Doctor
Tipo de programa: Grado
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2015
Fecha de finalización: 07/2016
Nº de horas/créditos ECTS: 3,94
Entidad de realización: Universidad del País Vasco
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.7

Tipo de docencia: Teórica presencial
Fecha de finalización: 07/2016
Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos
Tipo de entidad: Universidad
Calificación máxima posible: 5



Idioma de la asignatura: Euskera

6 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal / Personal Investigador Contratado Doctor
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2014 **Fecha de finalización:** 07/2015
Fecha de finalización: 07/2015 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 2,89
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.5 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

7 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal / Personal Investigador Contratado Doctor
Tipo de programa: Grado **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2013 **Fecha de finalización:** 07/2014
Fecha de finalización: 07/2014 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 7,45
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.6 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

8 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física Avanzada
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2012 **Fecha de finalización:** 07/2013



Fecha de finalización: 07/2013 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 3,7
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.8 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

9 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal / Personal Investigador Contratado Doctor
Tipo de programa: Grado **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Grado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 3
Fecha de inicio: 09/2012 **Fecha de finalización:** 07/2013
Fecha de finalización: 07/2013 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 5,7
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.6 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

10 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Experimentación Química Física
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal **Tipo de docencia:** Prácticas de Laboratorio
Tipo de programa: Licenciatura
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2011 **Fecha de finalización:** 07/2012
Fecha de finalización: 07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 2,6
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.7 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera



- 11** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física Avanzada
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2011 **Fecha de finalización:** 07/2012
Fecha de finalización: 07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 3,7
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.7 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera
- 12** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física Avanzada
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2010 **Fecha de finalización:** 07/2011
Fecha de finalización: 07/2011 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 3,7
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.6 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera
- 13** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Experimentación Química Física
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Prácticas de Laboratorio
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2009 **Fecha de finalización:** 07/2011
Fecha de finalización: 07/2011 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 6



Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.9 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

14 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Experimentación Química Física
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Prácticas de Laboratorio
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2009 **Fecha de finalización:** 09/2010
Fecha de finalización: 09/2010 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 6
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.8 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera

15 **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física Avanzada
Categoría profesional: Investigador Ramón y Cajal
Tipo de programa: Licenciatura **Tipo de docencia:** Teórica presencial
Tipo de asignatura: Troncal
Tipo de evaluación: Encuesta
Titulación universitaria: Licenciado en Ciencias Químicas
Curso que se imparte: 4
Fecha de inicio: 09/2009 **Fecha de finalización:** 09/2010
Fecha de finalización: 09/2010 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 3,8
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
Departamento: Ciencia y Tecnología de Polímeros
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Entidad de evaluación: Encuesta Alumnado
Tipo de evaluación: Encuesta
Calificación obtenida: 4.2 **Calificación máxima posible:** 5
Idioma de la asignatura: Euskera



Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** Preparación y caracterización de nanopartículas metálicas estabilizadas con polímeros conductivos para aplicaciones fotoquímicas
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Marek Grlezzczak
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Judit Cizaurre
Calificación obtenida: 7.6
Fecha de defensa: 19/09/2019
- 2 Título del trabajo:** Funcionalización C(sp³)-H de derivados de glicina catalizada por sales de Co: Estudio mecanístico
Tipo de proyecto: Master Thesis
Codirector/a tesis: Arkaitz Correa
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Paula Andrade Sampedro
Calificación obtenida: 9.5
Fecha de defensa: 18/09/2019
- 3 Título del trabajo:** PTEBS polimeroaren egitura eta propietate eroaleak fotosintesi artifizialean aplikatzeko
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Elisa Jimenez Izal
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Ibai Zarketa
Calificación obtenida: 9.1
Fecha de defensa: 16/09/2019
- 4 Título del trabajo:** Characterization of the Lowest Excited States in PDI Crystal Aggregates
Tipo de proyecto: Master Thesis
Codirector/a tesis: David Casanova
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Maria Zubiria Ulacia
Calificación obtenida: 7.0
Fecha de defensa: 29/07/2019
- 5 Título del trabajo:** Theoretical characterization of new dynamic bonds for responsive materials based on frustrated Lewis pairs
Tipo de proyecto: Master Thesis
Codirector/a tesis: Fernando Ruipérez
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Maialen Galdeano Fraile
Calificación obtenida: 7.0
Fecha de defensa: 29/07/2019
- 6 Título del trabajo:** Oxígeno espezie errektiboen bidezko histidinaren albo katearen oxidazioaren azterketa
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Jose M. Mercero Larraza
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad



Alumno/a: Nerea Incognito
Calificación obtenida: 7.5
Fecha de defensa: 15/03/2019

- 7 Título del trabajo:** Sufre-selenio loturaren eragina material autokonpongarrietan
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Amaia Ruiz
Calificación obtenida: 8.1
Fecha de defensa: 15/03/2019
- 8 Título del trabajo:** Tiolación de polietilenglicol para la funcionalización de nanopartículas de oro
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Marek Grzelczak
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Pedro Liz
Calificación obtenida: 8.4
Fecha de defensa: 11/03/2019
- 9 Título del trabajo:** Design of New Magnetic and Conductor Nanoparticles
Tipo de proyecto: Master Thesis
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Iker Ortiz de Luzuriaga
Calificación obtenida: 6.0
Fecha de defensa: 21/09/2018
- 10 Título del trabajo:** Metodo konputazional bitartezko oxigeno eta nitrogeno espezie erreaktiboen azterketa
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Xabier Lopez Pestaña
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Jokin Donazar
Calificación obtenida: 8.1
Fecha de defensa: 17/09/2018
- 11 Título del trabajo:** Theoretical Modeling of Dichalcogenide-based Self-Healing Materials
Tipo de proyecto: Master Thesis
Codirector/a tesis: Fernando Ruipérez
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Mikel Irigoyen Urtasun
Calificación obtenida: 9.0
Fecha de defensa: 27/07/2018
- 12 Título del trabajo:** Pt-zko Katalizatzaileen Dopaketa Desaktibazioa Murrizteko
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Elisa Jimenez Izal
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Andoni Ugartemendia Biurrun
Calificación obtenida: 9.8 (Matrícula de Honor)
Fecha de defensa: 13/07/2018



- 13** **Título del trabajo:** Influencia de los enlaces diseleniuro en materiales autorreparables
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Fernando Ruipérez
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Andrea Fernández
Calificación obtenida: 8.1
Fecha de defensa: 12/07/2018
- 14** **Título del trabajo:** Konposatu Autokonpongarrietan ematen diren disulfuro loturen azterketa teorikoa
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: Fernando Ruipérez Cillán
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Maialen Galdeano Fraile
Calificación obtenida: 9.8
Fecha de defensa: 19/09/2017
Doctorado Europeo: No
- 15** **Título del trabajo:** Estudio Teórico de las Propiedades Ópticas del Azuleno
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: David Casanova Casas
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Iker Arrieta
Calificación obtenida: 9.8
Fecha de defensa: 18/07/2017
Doctorado Europeo: No
- 16** **Título del trabajo:** Excitaciones Electrónicas Colectivas en Nanoclusters Metálicos
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Codirector/a tesis: David Casanova Casas
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Maria Zubiria Ulac
Calificación obtenida: 9.8
Fecha de defensa: 18/07/2017
Doctorado Europeo: No
- 17** **Título del trabajo:** Protein Oxidation by the Attack of OH Radicals
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Jesus M. Ugalde
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Jon Uranga Barandiaran
Calificación obtenida: Sobresaliente Cum Laude
Fecha de defensa: 03/07/2017
Doctorado Europeo: Si
Mención de calidad: No
- 18** **Título del trabajo:** Molecular Quantum Dynamical study of ultra-fast processes on the first two electronic excited states of azulene
Tipo de proyecto: Master Thesis
Codirector/a tesis: 1
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Xabier Telleria Allika



Calificación obtenida: 10.0
Fecha de defensa: 22/06/2017
Doctorado Europeo: No

19 Título del trabajo: Diseño de nuevos materiales nanoporosos basados en el autoensamblado de nanopartículas semiconductoras

Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado

Codirector/a tesis: Jesus Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad de realización: Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Juan José Gutiérrez Martín

Calificación obtenida: 6.4

Fecha de defensa: 23/03/2017

Doctorado Europeo: No

20 Título del trabajo: Excitaciones colectivas en clusters de aluminio y derivados

Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado

Codirector/a tesis: Jose Javier Lopez Pestaña

Entidad de realización: Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Mikel Irigoien

Calificación obtenida: 9.3

Fecha de defensa: 22/09/2016

Doctorado Europeo: No

21 Título del trabajo: DISULFURO LOTUREN BIDEZ AUTOKONPONTZEKO GAI DIREN MATERIALEN AZTERKETA TEORIKOA

Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado

Codirector/a tesis: Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad de realización: Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Ekiñe Gimenez

Calificación obtenida: 8.8

Fecha de defensa: 20/09/2016

Doctorado Europeo: No

22 Título del trabajo: Diseño de nuevas nanopartículas semiconductoras magnéticas

Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado

Codirector/a tesis: Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad de realización: Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Iker Ortiz de Luzuriaga

Calificación obtenida: 8.1

Fecha de defensa: 19/09/2016

Doctorado Europeo: No

23 Título del trabajo: Structure and Electronic Properties of Endohedrally Doped II-VI Hollow Nanoclusters

Tipo de proyecto: Tesis Doctoral

Codirector/a tesis: Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad de realización: Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Alumno/a: Elisa Jimenez Izal

Calificación obtenida: Excellent Cum Laude

Fecha de defensa: 05/09/2014

Doctorado Europeo: Si

Fecha de mención: 05/09/2014



- 24** **Título del trabajo:** Protein Damage by Oxidative Stress
Tipo de proyecto: Master Thesis
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Jon Uranga Barandiaran
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 30/06/2014
- 25** **Título del trabajo:** Diseño de novo de nanomateriales semiconductores basados en los fullerenos de los elementos II-VI
Tipo de proyecto: Master Thesis
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Elisa Jimenez Izal
Calificación obtenida: Sobresaliente por unanimidad
Fecha de defensa: 22/10/2010

Experiencia científica y tecnológica

Grupos/equipos de investigación, desarrollo o innovación

- 1** **Nombre del grupo:** Kimika Teorikoa
Nombre del investigador/a principal (IP): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria
Clase de colaboración: Coautoría de proyectos y de su desarrollo
Ciudad de radicación: Donostia, País Vasco, España
Entidad de afiliación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nº de tesis dirigidas: 17
Fecha de inicio: 01/2007 **Duración:** 8 años - 4 meses
- 2** **Nombre del grupo:** Theoretical Biophysics Group
Nombre del investigador/a principal (IP): Leif A. Eriksson
Clase de colaboración: Coautoría de proyectos y de su desarrollo
Ciudad de radicación: Örebro, Suecia
Entidad de afiliación: Örebro University **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 01/01/2005 **Duración:** 2 años
- 3** **Nombre del grupo:** Theory of Condensed Matter
Nombre del investigador/a principal (IP): Richard Needs
Clase de colaboración: Coautoría de proyectos y de su desarrollo
Ciudad de radicación: Cambridge, Reino Unido
Entidad de afiliación: Cavendish Laboratory, Cambridge University **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 07/2001 **Duración:** 3 meses
- 4** **Nombre del grupo:** Kimika Teorikoa
Nombre del investigador/a principal (IP): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria
Clase de colaboración: Coautoría de proyectos y de su desarrollo
Ciudad de radicación: Donostia, País Vasco, España
Entidad de afiliación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 10/1998 **Duración:** 6 años - 2 meses



- 5** **Nombre del grupo:** Theoretical Chemistry Group
Nombre del investigador/a principal (IP): F. B. van Duijneveldt
Clase de colaboración: Coautoría de publicaciones
Ciudad de radicación: Utrecht, Utrecht, Holanda
Entidad de afiliación: Utrecht University **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio: 09/1996 **Duración:** 2 años

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1** **Nombre del proyecto:** ANALISIS CUANTITATIVO DE LA CONTRIBUCION DE CARGAS CALIENTES Y DEL EFECTO TERMICO EN FOTOCATALISIS ASISTIDA POR EFECTO PLASMONICO
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: CENTRO DE FISICA DE MATERIALES **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jon M. Matxain Beraza; Marek Grzelczak
Nº de investigadores/as: 4 **Nº de personas/año:** 4
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación **Tipo de entidad:** Organismo Público
Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España
Tipo de participación: Investigador principal
Nombre del programa: Programas Estatales de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i y de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad,
Cód. según financiadora: PID2019-111772RB-I00
Fecha de inicio-fin: 01/06/2020 - 31/12/2022 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 108.000 €
- 2** **Nombre del proyecto:** Kimika Teorikoa: Avances en Química Cuántica: Avances teóricos y aplicación en bioquímica computacional, nanociencia y materiales poliméricos
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Autonómica
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde
Nº de investigadores/as: 15
Entidad/es financiadora/s: Gobierno Vasco **Tipo de entidad:** Administrative BodyB
Ciudad entidad financiadora: España
Tipo de participación: Miembro de equipo
Cód. según financiadora: IT1254-19
Fecha de inicio-fin: 2019 - 2021 **Duración:** 3 años



Cuantía total: 254.714 €

3 Nombre del proyecto: Ayudas Para La Incorporación Estable De Doctores 2017

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jon M Matxain Beraza

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

Ministerios de Economía y Competitividad

Tipo de entidad: Gobierno Estado

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Tipo de participación: Investigador principal

Cód. según financiadora: IEDI-2017-00929

Fecha de inicio-fin: 2018 - 2020

Duración: 3 años

Cuantía total: 100.000 €

4 Nombre del proyecto: NANOCCLUSERS METALICOS, COVALENTES Y VAN DER WAALS: ¿ALGO EN COMUN?

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Nº de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s:

Ministerios de Economía y Competitividad

Tipo de entidad: Gobierno Estado

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Tipo de participación: Miembro de equipo

Cód. según financiadora: CTQ2015-67660-P

Fecha de inicio-fin: 2016 - 2018

Duración: 3 años

Cuantía total: 98.000 €

5 Nombre del proyecto: Efectos del aluminio en Sistemas Biológicos: Una aproximación computacional

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Javier Lopez Pestaña

Entidad/es financiadora/s:

Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad financiadora: Bilbao, País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: PES14/35

Fecha de inicio-fin: 2014 - 2018

Duración: 3 años

Cuantía total: 34.586,39 €



- 6** **Nombre del proyecto:** Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Unión Europea
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus Maria Ugalde Uribe-Etxebarria
Nº de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s: Comisión Europea **Tipo de entidad:** Union Europea
Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España
Tipo de participación: Miembro de equipo
Cód. según financiadora: 642294-TCCM
Fecha de inicio-fin: 2014 - 2018 **Duración:** 4 años
Cuantía total: 3.000.000 € **Cuantía subproyecto:** 249.876 €
- 7** **Nombre del proyecto:** Avances en Química Cuántica
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria
Entidad/es financiadora/s: Departamento de Educación y Universidades. Gobierno Vasco **Tipo de entidad:** Gobierno Vasco
Tipo de participación: Otros
Cód. según financiadora: IT588-13
Fecha de inicio-fin: 2013 - 2018 **Duración:** 6 años
Cuantía total: 401.598 €
- 8** **Nombre del proyecto:** Interacción del Al(III) con bioligandos y efectos radicalarios en biomoléculas
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Javier Lopez Pestaña
Entidad/es financiadora/s: Ministerios de Economía y Competitividad **Tipo de entidad:** Gobierno Estado
Ciudad entidad financiadora: Madrid, España
Tipo de participación: Otros
Cód. según financiadora: CTQ2012-38496-C05-04
Fecha de inicio-fin: 2013 - 2015 **Duración:** 3 años
Cuantía total: 28.000 €
- 9** **Nombre del proyecto:** Diseño de nuevos materiales nanoporosos basados en el autoensamblado de nanopartículas semiconductoras
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Autonómica



Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jon M. Matxain Beraza

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Tipo de participación: Coordinador

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC13UN001

Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 30/06/2014

Duración: 1 año

Cuantía total: 7.746,7 €

10 Nombre del proyecto: Bases moleculares de la toxicidad del aluminio: afinidad del aluminio por fosfatos de interés biológico y activación de estrés oxidativo

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Javier Lopez Pestaña

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC13UN003

Fecha de inicio-fin: 2013 - 2014

Duración: 1 año

Cuantía total: 7.746,7 €

11 Nombre del proyecto: Descripción de interacciones no covalentes por medio del método PNOF5-PT2

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Mario Piris Silvera

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC13UN005

Fecha de inicio-fin: 2013 - 2014

Duración: 1 año

Cuantía total: 7.746,7 €

12 Nombre del proyecto: Estrategias computacionales para la optimización de celdas solares de inyección directa

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica



Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): David Casanova Casas

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC13UN002

Fecha de inicio-fin: 2013 - 2014

Duración: 1 año

Cuantía total: 7.586,39 €

13 Nombre del proyecto: Las especies reactivas de oxígeno (ROS) y la enfermedad de Alzheimer

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jon M. Matxain Beraza

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Tipo de participación: Coordinador

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC12UN006

Fecha de inicio-fin: 01/01/2012 - 31/12/2013

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.110,59 €

14 Nombre del proyecto: Bioquímica cuántica: Estrés oxidativo en proteínas causado por especies reactivas de oxígeno y nitrógeno y su prevención por antioxidantes

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Coordinador del proyecto total, red o consorcio

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jon M. Matxain Beraza

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación

Tipo de entidad: Gobierno

Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España

Tipo de participación: Investigador principal

Cód. según financiadora: RyC 2008-03216

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2013

Duración: 5 años

Cuantía total: 192.480 €

15 Nombre del proyecto: Aplicación de la teoría de orbitales naturales a nanopartículas biológicas

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a



Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Mario Piris Silvera

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC12UN005

Fecha de inicio-fin: 2012 - 2013

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.110,59 €

16 Nombre del proyecto: Diseño de nuevos nanomateriales semiconductores para su posible aplicación en biología

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC12UN003

Fecha de inicio-fin: 2012 - 2013

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.110,59 €

17 Nombre del proyecto: Explosiones Culómbicas inducidas por pulsor laser ultraintenso y ultracorto

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Andreas Heidenreich

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC12UN002

Fecha de inicio-fin: 2012 - 2013

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.110,59 €

18 Nombre del proyecto: Interacciones no covalentes como pasos preliminares en reacciones químicas

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad



Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Slawomir J Grabowski

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC12UN004

Fecha de inicio-fin: 2012 - 2013

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.110,59 €

19 Nombre del proyecto: Aplicación de la teoría de orbitales naturales a sistemas biológicos

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Mario Piris Silvera

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC11UN003

Fecha de inicio-fin: 2011 - 2012

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.155,08 €

20 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica y algunas aplicaciones a problemas seleccionados de nanociencia y biofísica

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipo de entidad: Gobierno Estado

Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: CTQ2011-27374

Fecha de inicio-fin: 2011 - 2012

Duración: 1 año

Cuantía total: 14.520 €

21 Nombre del proyecto: Diseño de nanopartículas magnéticas para su aplicación en nano-aparatos

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:



Departamento de Industria. Gobierno Vasco
Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC11UN006

Fecha de inicio-fin: 2011 - 2012

Duración: 2 años

Cuantía total: 25.180,08 €

22 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Educación y Universidades. Gobierno Vasco

Tipo de participación: Otros

Cód. según financiadora: IT33007

Fecha de inicio-fin: 2007 - 2012

Duración: 6 años

Cuantía total: 588.176,61 €

23 Nombre del proyecto: Nanopartículas semiconductoras en entorno biológico: ¿aplicaciones biomédicas?

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jose Javier Lopez Pestaña

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: SA-2010/00057

Fecha de inicio-fin: 2010 - 2011

Duración: 2 años

Cuantía total: 54.188,03 €

24 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica y su aplicación a problemas seleccionados de nanotecnología y bioquímica

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipo de entidad: Gobierno Estado

Ciudad entidad financiadora: Madrid, Comunidad de Madrid, España

Tipo de participación: Otros



Cód. según financiadora: CTQ200895739/BQU

Fecha de inicio-fin: 2008 - 2011

Cuantía total: 181.999,99 €

Duración: 4 años

25 Nombre del proyecto: Nanopartículas semiconductoras en entorno biológico: ¿aplicaciones biomédicas?

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Cód. según financiadora: S-PC9UN02

Fecha de inicio-fin: 2009 - 2010

Duración: 2 años

Cuantía total: 62.875,13 €

26 Nombre del proyecto: Ensamblado de Nanoclusters: desarrollo de nuevos materiales semiconductores y magnéticos nanoporosos

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Fecha de inicio-fin: 2007 - 2008

Duración: 2 años

Cuantía total: 45.000 €

27 Nombre del proyecto: Ensamblado de Nanoclusters: desarrollo de nuevos materiales semiconductores

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Departamento de Industria. Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Gobierno Vasco

Ciudad entidad financiadora: País Vasco, España

Tipo de participación: Otros

Nombre del programa: SAIOTEK

Fecha de inicio-fin: 2006 - 2007

Duración: 3 años

Cuantía total: 35.000 €



- 28** **Nombre del proyecto:** Molecular modeling of lignin biosynthesis and degradation
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Suecia
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Örebro University **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Örebro, Suecia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Leif A. Eriksson
Entidad/es financiadora/s:
WURC (Wood Ultrastructure Research Center) **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Ciudad entidad financiadora: Suecia
Tipo de participación: Otros
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2006 **Duración:** 1 año
- 29** **Nombre del proyecto:** Properties and reactions of anthraquinones
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Suecia
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Örebro University **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Örebro, Suecia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Leif A. Eriksson
Entidad/es financiadora/s:
EKA Chemicals **Tipo de entidad:** Entidad Empresarial
Ciudad entidad financiadora: Suecia
Tipo de participación: Otros
Fecha de inicio-fin: 2006 - 2006 **Duración:** 1 año
Cuantía total: 25.000 €
- 30** **Nombre del proyecto:** New Strategies for Photochemical Properties and Reactions in Pharmacology and Biomedicine
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Suecia
Grado de contribución: Investigador/a
Entidad de realización: Örebro University **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Örebro, Suecia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Leif A. Eriksson
Entidad/es financiadora/s:
National Science Research Center **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Ciudad entidad financiadora: Suecia
Tipo de participación: Otros
Fecha de inicio-fin: 2005 - 2006 **Duración:** 2 años
Cuantía total: 39.600 €
- 31** **Nombre del proyecto:** Avances en Química Cuántica
Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.). **Ámbito geográfico:** Nacional



Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Institución

Ciudad entidad financiadora: España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 2001 - 2003

Duración: 3 años

32 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Institución

Ciudad entidad financiadora: España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 2001 - 2003

Duración: 3 años

33 Nombre del proyecto: Investigación de nuevos materiales para el desarrollo de células solares de gran eficiencia

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad financiadora: Bilbao, País Vasco, España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 1999 - 2002

Duración: 4 años

34 Nombre del proyecto: Clusters de Metales de transición. Apantallamiento Electronico

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: Donostia, País Vasco, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Universidad del País Vasco

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad financiadora: Bilbao, País Vasco, España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 1998 - 2001

Duración: 4 años



35 Nombre del proyecto: Avances en el desarrollo y la aplicación de la química cuántica al estudio de moléculas con metales de transición

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Nacional

Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA

Ciudad entidad financiadora: España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 1998 - 2000

Duración: 2 años

36 Nombre del proyecto: Estructura y propiedades de clusters con aplicaciones tecnológicas

Modalidad de proyecto: De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).

Ámbito geográfico: Autonómica

Grado de contribución: Titulado/a universitario/a en formación

Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria

Entidad/es financiadora/s:

Gobierno Vasco

Tipo de entidad: Institución

Ciudad entidad financiadora: España

Tipo de participación: Becario

Fecha de inicio-fin: 1999 - 1999

Duración: 1 año

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 28

Fecha de aplicación: 20/02/2020

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

1 Virginia San Nacienceno; Maria Angeles Garralda; Jon Mattin Matxain; Zoraida Freixa. Proton-responsive Ruthenium(II) Catalysts for the Solvolysis of Ammonia-Borane. *Organometallics*. 39, pp. 1238 - 1248. American Chemical Society, 12/03/2020. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acs.organomet.0c00032>>.

DOI: 10.1021/acs.organomet.0c00032

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.100

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 0



Publicación relevante: Si

- 2** Mikel Irigoyen; Jon M. Matxain; Fernando Ruipérez. Effect of Molecular Structure in the Chain Mobility of Dichalcogenide-Based Polymers with Self-Healing Capacity. *Polymers*. 11, pp. 1960. MDPI, 29/11/2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.3390/polym11121960>>.

DOI: <https://doi.org/10.3390/polym11121960>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.164

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - POLYMER SCIENCE

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 0

- 3** Ainara Erice; Itxaso Azcune; Alaitz Ruiz de Luzuriaga; Fernando Ruipérez; Mikel Irigoyen; Jon M. Matxain; José M. Asua; Hans Jurgen Grande; Alaitz Rekondo. Effect of Regioisomerism on Processability and Mechanical Properties of Amine/Urea Exchange Based Poly(urea-urethane) Vitrimers. *ACS Applied Polymer Materials*. 1, pp. 2472 - 2481. ACS, 23/08/2019. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1021/acsapm.9b00589>>.

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsapm.9b00589>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: No II yet

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - POLYMER SCIENCE

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 2

- 4** Fariyah Haque; Ca'ra M. Schexnayder; Jon M. Matxain; Fabienne Barroso-Bujans; Scott M. Grayson; David Casanova. MALDI-ToF MS Study of Macrocyclic Polyethers Generated by Electrophilic Zwitterionic Ring Expansion Polymerization of Monosubstituted Epoxides with B(C₆F₅)₃. *Macromolecules*. 52, pp. 6369 - 6381. ACS, 19/08/2019. Disponible en Internet en: <<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.9b01050>>.

DOI: [10.1021/acs.macromol.9b01050](https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.9b01050)

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.997

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - POLYMER SCIENCE

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 0

- 5** Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde; Vladimiro Mujica; S. I. Allec; B. M. Wong; David Casanova. Chirality induced spin selectivity of photoexcited electrons in carbon? sulfur[n]helicenes. *ChemPhotoChem*. 3, pp. 1 - 9. Wiley, 02/06/2019.

DOI: [10.1002/cptc.201900128](https://doi.org/10.1002/cptc.201900128)

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Tipo de soporte: Revista



Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: No II yet

Publicación relevante: Si

- 6** Jose I. Santos; Ivan Rivilla; Fernando P. Cossío; Francisco J. García García; Jon M. Matxain; Marek Grzelczak; S. K. S. Mazinani; Jesus M. Ugalde; Vladimiro Mujica. Reply to "Coment on 'Chirality-Induced Electron Spin Polarization and Enantiospecific Response in Solid-State Cross-Polarization Nuclear Magnetic Resonance' ". ACS Nano. 13 - 6, pp. 6133 - 6136. ACS, 28/05/2019. ISSN 0002-7863

DOI: 10.1021/acsnano.9b00946

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 13.903

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Citas: 0

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 0

- 7** Amaia Ruiz; Mikel Irigoyen; Andrea Fernandez; Fernando Ruipérez; Jon M. Matxain. Diselenide Bonds as an Alternative to Outperform the Efficiency of Disulfides in Self-Healing Materials. Journal of Organic Chemistry. 84, pp. 4200 - 4210. ACS, 19/03/2019. ISSN 1520-6904

DOI: 10.1021/acs.joc.9b00014

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.745

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 2

- 8** Juan I. Santos; Ivan Rivilla; Fernando P. Cossio; Jon M. Matxain; Marek Grzelczak Vitoria; S. K. S. Mazinani; Jesus M. Ugalde; Vladimiro Mujica. Chirality-Induced Electron Spin Polarization and Enantiospecific Response in Solid-State Cross-Polarization Nuclear Magnetic Resonance. ACS Nano. 12, pp. 11426 - 11433. ACS, 27/11/2018. ISSN 0002-7863

DOI: 10.1021/acsnano.8b06467

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 13.903

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 6**Publicación relevante:** Si

- 9** Lorenzo Vallan; Esteban P. Urriolabeitia; Fernando Ruipérez; Jon M. Matxain; Ruben Canton Vitoria; Nikos Tagmatarchis; Ana M. Benito; Wolfgang K. Maser. Supramolecular-enhanced charge-transfer within entangled polyamide chains as origin of the universal blue fluorescence of polymer carbon dots. *Journal of the American Chemical Society*. 140, pp. 12862 - 12869. ACS, 14/09/2018. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.8b06051>>. ISSN 0002-7863

DOI: 10.1021/jacs.8b06051**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 14.695**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Autor de correspondencia:** No**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 38

- 10** Ainara Erice; Alaitz Ruiz de Luzuriaga; Jon M. Matxain; Fernando Ruipérez; Jose M. Asua; Hans J. Grande; Alaitz Rekondo. Reprocessable and recyclable crosslinked poly(urea-urethane)s based on dynamic amine/urea exchange. *Polymer*. 145, pp. 127 - 136. Elsevier, 06/06/2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1016/j.polymer.2018.04.076>>. ISSN 0032-3861

DOI: 10.1016/j.polymer.2018.04.076**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.775**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Autor de correspondencia:** No**Categoría:** Science Edition - POLYMER SCIENCE**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 14

- 11** Jon Uranga; Jon Iñaki Mujika; Rafael Grande-Aztatzi; Jon M. Matxain. Oxidation of Acid, Base, and Amide Side-Chain Amino Acid Derivatives via Hydroxyl Radical. *Journal of Physical Chemistry B*. 122 - 19, pp. 4956 - 4971. American Chemical Society, 20/04/2018. Disponible en Internet en: <<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b12450>>. ISSN 1520-6106

DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12450**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.923**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Citas:** 2

- 12** Fernando Ruipérez; Maialen Galdeano; Ekiñe Gimenez; Jon M. Matxain. Sulfenamides as Building Blocks for Efficient Disulfide-Based Self-Healing Materials. A Quantum Chemical Study. *ChemistryOpen*. 7 - 3, pp. 248 - 255. Wiley, 06/03/2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/open.201800003>>. ISSN 2191-1363
DOI: 10.1002/open.201800003
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.205
Fuente de citas: WOS
Publicación relevante: Si
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Autor de correspondencia: Si
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Citas: 4
- 13** Maude Desroches; Paula Mayorga Burrezo; Joël Boismenu Lavoie; Miriam Peña Alvarez; Carlos Gómez García; Jon M. Matxain; David Casanova; Jean-François Morin; Juan Casado. Breaking bonds, Forming Nanographene Diradicals with Pressure. *Angewandte Chemie. International Edition*. 56, pp. 16212 - 16217. Royal Society of Chemistry, 28/11/2017. ISSN 1433-7851
DOI: 10.1002/anie.201708740
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 6
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.994
Fuente de citas: WOS
Publicación relevante: Si
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Autor de correspondencia: No
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 9
- 14** Elena Formoso; Jon M. Matxain; Jose M. Asua; Fernando Ruipérez. The role of non-covalent interactions in the self-healing mechanism of disulfide-based polymers. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19, pp. 18461 - 18470. Royal Society of Chemistry, 01/07/2017. ISSN 1932-7447
DOI: 10.1039/C7CP03570E
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.906
Fuente de citas: WOS
Publicación relevante: Si
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Autor de correspondencia: Si
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 8
- 15** Jon Uranga; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde; David Casanova Casas. Photosensitization mechanism of Cu(II) porphyrins. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19, pp. 20533. Royal Society of Chemistry, 29/06/2017. ISSN 1932-7447
DOI: 10.1039/C7CP03319B
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
- Tipo de soporte:** Revista



Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.906

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

- 16** Xiaowei An; Robert H. Aguirresarobe; Lourdes Irusta; Fernando Ruiperez; Jon M. Matxain; Xiangqiang Pan; Nora Aramburu; David Mecerreyes; Haritz Sardon; Jian Zhu. Aromatic diselenide crosslinkers to enhance the reprocessability and self-healing of polyurethane thermosets. *Polymer Chemistry*. 8, pp. 3641 - 3646. Royal Society of Chemistry, 22/05/2017. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2017/PY/C7PY00448F#divAbstract>>. ISSN 1932-7447

DOI: 10.1039/c7py00448f

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.927

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 2

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - POLYMER SCIENCE

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 36

- 17** Jon Uranga Barandiaran; Oier Lakuntza Irigoien; Eloy Ramos Cordoba; Jon M. Matxain; Jon I. Mujika. A computational study of radical initiated protein backbone homolytic dissociation on all natural amino acids. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 18, pp. 30972 - 30981. Royal Society of Chemistry, 18/10/2016. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.6b03210>>. ISSN 1932-7447

DOI: 10.1039/C6CP06529E

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 4

- 18** Alaitz Ruiz de Luzuriaga; Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Roberto Martin; Jose M. Asua; German Cabañero; Ibon Odriozola. Transient mechanochromism in epoxy vitrimer composites containing aromatic disulfide crosslinks. *Journal of Materials Chemistry C*. 4, pp. 6220 - 6224. Royal Society of Chemistry, 08/06/2016. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2016/TC/C6TC02383E#divAbstract>>.

DOI: 10.1039/C6TC02383E

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No



Índice de impacto: 5.256

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 41

- 19** David Casanova; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. Plasmonic Resonances in the Al₁₃ Cluster: Quantification and Origin of Exciton Collectivity. Journal of Physical Chemistry C. 120, pp. 12742 - 12750. American Chemical Society, 20/05/2016. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.6b03210>>. ISSN 1932-7447

DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b03210

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.536

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 12

- 20** Rafael Grande Aztatzji; Elena Formoso; Jose M. Mercero; Jon M. Matxain; Slawomir J. Grabowski; Jesus M. Ugalde. Structural and optical properties of the naked and passivated Al₅Au₅ bimetallic nanoclusters. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 144, pp. 114302. American Institute of Physics, 15/03/2016. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/144/11/10.1063/1.4943129>>. ISSN 0021-9606

DOI: 10.1063/1.4943129

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.965

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: No

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 3

- 21** Jon M. Matxain; Jose M. Asua; Fernando Ruiperez. Design of new disulfide-based organic compounds for the improvement of self-healing materials. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 18, pp. 1758 - 1770. RSC, 01/2016. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2016/CP/C5CP06660C#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

DOI: 10.1039/C5CP06660C

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 41



Publicación relevante: Si

- 22** Jon M. Azpiroz; Jon M. Matxain; Ivan Infante; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. A DFT/TDDFT study on the optoelectronic properties of the amine-capped magic (CdSe)(13) nanocluster. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 15 - 26, pp. 10996 - 11005. RSC, 05/2013. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/cp/c3cp51687c#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.198

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 38

- 23** J. I. Mujika; J. Uranga; J. M. Matxain. Computational Study on the Attack of (OH)-O-center dot Radicals on Aromatic Amino Acids. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 19 - 21, pp. 6862 - 6873. Wiley, 05/2013. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201203862/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.696

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 17

- 24** Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Ivan Infante; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde; Gabriel Merino; Mario Piris. Communication: Chemical bonding in carbon dimer isovalent series from the natural orbital functional theory perspective. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 138 - 15, pp. 151102. AIP, 04/2013. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/138/15/10.1063/1.4802585>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.122

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 26

- 25** F. Ruiperez; M. Piris; J. M. Ugalde; J. M. Matxain. The natural orbital functional theory of the bonding in Cr-2, Mo-2 and W-2. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 15 - 6, pp. 2055 - 2062. RSC, 01/2013. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2013/CP/C2CP43559D#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.198

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 26



Publicación relevante: Si

- 26** Xabier Lopez; Fernando Ruiperez; Mario Piris; Jon M. Matxain; Eduard Matito; Jesus M. Ugalde. Performance of PNOF5 Natural Orbital Functional for Radical Formation Reactions: Hydrogen Atom Abstraction and C-C and O-O Homolytic Bond Cleavage in Selected Molecules. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION. 8 - 8, pp. 2646 - 2652. ACS Publications, 08/2012. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct300414t>>. ISSN 1549-9618

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.389

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 21

- 27** M. Piris; X. Lopez; F. Ruiperez; J. M. Matxain; J. M. Ugalde. A natural orbital functional for multiconfigurational states. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 134 - 16, pp. 164102. AIP, 04/2011. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/134/16/10.1063/1.3582792>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.333

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 85

- 28** J. M. Matxain; M. Piris; F. Ruiperez; X. Lopez; J. M. Ugalde. Homolytic molecular dissociation in natural orbital functional theory. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 13 - 45, pp. 20129 - 20135. RSC, 2011. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2011/CP/c1cp21696a#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.573

Fuente de citas: WOS

Resultados relevantes: Portada del número

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 25

- 29** M. Piris; J. M. Matxain; X. Lopez; J. M. Ugalde. Communication: The role of the positivity N-representability conditions in natural orbital functional theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 133 - 11, pp. 111101. AIP, 09/2010. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/133/11/10.1063/1.3481578>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 2.920**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 51

- 30** M. Piris; J. M. Matxain; X. Lopez; J. M. Ugalde. Communications: Accurate description of atoms and molecules by natural orbital functional theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 132 - 3, pp. 031103. AIP, 01/2010. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/132/3/10.1063/1.3298694>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.921**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 52

- 31** X. Lopez; M. Piris; J. M. Matxain; J. M. Ugalde. {Performance of PNOF3 for reactivity studies: X({}BO) and X({}CN] isomerization reactions (X = H, Li) as a case study}. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 12 - 40, pp. 12931 - 12934. RSC, 2010. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2010/CP/c003379k#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.453**Fuente de citas:** WOS**Resultados relevantes:** Portada del número**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 14

- 32** Jon M. Matxain; Daniel Padro; Mikael Ristila; Ake Strid; Leif A. Eriksson. Evidence of High center dot OH Radical Quenching Efficiency by Vitamin B-6. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 113 - 29, pp. 9629 - 9632. ACS Publications, 07/2009. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp903023c>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.471**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Citas:** 38

- 33** M. Piris; J. M. Matxain; X. Lopez; J. M. Ugalde. Spin conserving natural orbital functional theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 131 - 2, AIP, 07/2009. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/131/2/10.1063/1.3180958>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo



Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.093

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 42

- 34** Jose M. Mercero; Mario Piris; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. Sandwich Complexes of the Metalloaromatic eta(3)-Al3R3 Ligand. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 131 - 20, pp. 6949 - 6951. ACS Publications, 05/2009. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja8095043>>. ISSN 0002-7863

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 8.580

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 12

- 35** Jon M. Matxain; Mario Piris; Xabier Lopez; Jesus M. Ugaide. Thermally Stable Solids Based on Endohedrally Doped ZnS Clusters. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 15 - 20, pp. 5138 - 5144. Wiley, 2009. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200802472/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.382

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 13

- 36** J. M. Matxain; L. A. Eriksson; J. M. Mercero; X. Lopez; M. Piris; J. M. Ugalde; J. Poater; E. Matito; M. Sola. New solids based on B12N12 fullerenes. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 111 - 36, pp. 13354 - 13360. ACS Publications, 09/2007. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp073773j>>. ISSN 1932-7447

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.396

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 37

- 37** Klefah A. K. Musa; Jon M. Matxain; Leif A. Eriksson. Mechanism of photoinduced decomposition of ketoprofen. JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY. 50 - 8, pp. 1735 - 1743. ACS Publications, 04/2007. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jm060697k>>. ISSN 0022-2623

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.115

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MEDICINAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 47

- 38** Jon M. Matxain; Mikael Ristilla; Ake Strid; Leif A. Eriksson. Theoretical study of the reaction of vitamin B-6 with O-1(2). CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 13 - 16, pp. 4636 - 4642. Wiley, 2007. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200700002/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.015

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 37

- 39** Jon M. Matxain; Leif A. Eriksson; Jose M. Mercero; Jesus M. Ugalde; Eleonora Spano; Said Hamad; C. Richard A. Catlow. Electronic excitation energies of ZnSi nanoparticles. NANOTECHNOLOGY. 17 - 16, pp. 4100 - 4105. IOP Science, 08/2006. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/0957-4484/17/16/018/>>. ISSN 0957-4484

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.037

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 16

- 40** JM Mercero; JM Matxain; X Lopez; DM York; A Largo; LA Eriksson; JM Ugalde. Theoretical methods that help understanding the structure and reactivity of gas phase ions. INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY. 240 - 1, pp. 37 - 99. Elsevier, 01/2005. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387380604003744>>. ISSN 1387-3806

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.090

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 92

- 41** JM Mercero; JM Matxain; JM Ugalde. Mono- and multidecker sandwich-like complexes of the tetraazacyclobutadiene aromatic ring. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 43 - 41, pp. 5485 - 5488. Wiley, 2004. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.200460498/abstract>>. ISSN 1433-7851



Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 9.161

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 42

- 42** JM Matxain; JM Ugalde; MD Towler; RJ Needs. Stability and aromaticity of BiNi rings and fullerenes. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 46, pp. 10004 - 10010. ACS Publications, 11/2003. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp036296n>>. ISSN 1089-5639

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.792

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 40

- 43** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Electronic excitation energies of ZnO clusters. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 125 - 31, pp. 9494 - 9499. ACS Publications, 08/2003. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja0264504>>. ISSN 0002-7863

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.516

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 79

- 44** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of group-(II-VI) materials: Zn_iX_i, X=Se,Te, i=1-9. PHYSICAL REVIEW A. 64 - 5, pp. 053201. APS Journals, 02/10/2001. Disponible en Internet en: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.64.053201>>. ISSN 1050-2947

DOI: 10.1103/PhysRevA.64.053201

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.810

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 62

- 45** JM Matxain; A Irigoras; JE Fowler; JM Ugalde. Electronic excitation energies of ZnSi clusters. PHYSICAL REVIEW A. 64 - 1, pp. 013201. APS Journals, 13/06/2001. Disponible en Internet en: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.64.013201>>. ISSN 1050-2947



DOI: 10.1103/PhysRevA.64.013201

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.810

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 62

- 46** JM Matxain; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of II-VI materials: Zn_iO_i , $i=1-9$. PHYSICAL REVIEW A. 62 - 5, pp. 053201. APS Journals, 18/10/2000. Disponible en Internet en: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.62.053201>>. ISSN 1050-2947

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.831

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 83

- 47** JM Matxain; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of II-VI materials: Zn_iSi_i , $i=1-9$. PHYSICAL REVIEW A. 61 - 5, pp. 053201. APS Journals, 14/04/2000. Disponible en Internet en: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.61.053201>>. ISSN 1050-2947

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.831

Fuente de citas: WOS

Publicación relevante: Si

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 54

- 48** Jon Uranga; Jon I. Mujika; Jon M. Matxain. ·OH Oxidation Towards S- and OH- Containing Amino Acids. Journal of Physical Chemistry B. 119, pp. 15430. ACS, 20/11/2015. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.5b09825>>. ISSN 1520-6106

DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b09825

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.187

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Autor de correspondencia: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 12

- 49** Elisa Jimenez Izal; Jon M. Azpiroz; Riti Gupta; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. CdS nanoclusters doped with divalent atoms. *Journal of Molecular Modeling*. 20, pp. 2227. Springer, 30/06/2014. Disponible en Internet en: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-014-2227-3>>. ISSN 1610-2940
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Citas: 1
- 50** Elisa Jimenez Izal; Diego Moreno; Jose M. Mercero Larraza; Jon M. Matxain Beraza; Martha Audiffred; Gabriel Merino; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria. Doped Aluminum Cluster Anions: Size Matters. *Journal of Physical Chemistry A*. 118 - 24, pp. 4309 - 4314. ACS Publishing, 19/05/2014. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp501496b>>. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.693
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 9
- 51** M. Piris; F. Ruiperez; J. M. Matxain. Assessment of the second-order perturbative corrections to PNOF5. *MOLECULAR PHYSICS*. 112 - 5-6, SI, pp. 1 - 8. Taylor & Francis, 03/2014. Disponible en Internet en: <<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2013.854933#.VSZSMZSsXmE>>. ISSN 0026-8976
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.720
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 5
- 52** M. Piris; J. M. Matxain; X. Lopez. The intrapair electron correlation in natural orbital functional theory. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. 139 - 23, pp. 234109. AIP, 12/2013. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/139/23/10.1063/1.4844075>>. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.122
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 36
- 53** Elisa Jimenez Izal; Jon M. Matxain Beraza; Mario Piris Silvera; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria. Second-Row Transition Metal doping of ZnSi (i=12,16) nanoclusters: Structural and Magnetic Properties. *Computation*. 1 - 3, pp. 31 - 45. MDPI, 14/11/2013. Disponible en Internet en: <<http://www.mdpi.com/2079-3197/1/3/31>>. DOI: 10.3390/computation1030031
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 2**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

- 54** Oier Lakuntza; Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Jesus M. Ugalde; Peter B. Armentrout. Quantum Chemical Study of the Reactions between Pd+/Pt+ and H₂O/H₂S. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 19 - 27, pp. 8832 - 8838. Wiley, 07/2013. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201300222/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.696**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 2

- 55** Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Mario Piris. Computational study of Be-2 using Piris natural orbital functionals. JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. 19 - 5, pp. 1967 - 1972. Springer, 05/2013. Disponible en Internet en: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-012-1548-3>>. ISSN 1610-2940

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.867**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Citas:** 1

- 56** Jon I. Mujika; Jon M. Matxain. Theoretical study of the pH-dependent antioxidant properties of vitamin C. JOURNAL OF MOLECULAR MODELING. 19 - 5, pp. 1945 - 1952. Springer, 05/2013. Disponible en Internet en: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-012-1465-5>>. ISSN 1610-2940

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.867**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Citas:** 7

- 57** Mario Piris; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. The one-electron picture in the Piris natural orbital functional 5 (PNOF5). THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 132 - 2, pp. 1298. Springer, 02/2013. Disponible en Internet en: <<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00214-012-1298-4>>. ISSN 1432-881X

DOI: 10.1007/s00214-012-1298-4**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.143**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Citas:** 21

- 58** Elisa Jimenez-Izal; Jon M. Matxain; Mario Piris; Jesus M. Ugalde. Self-assembling endohedrally doped CdS nanoclusters: new porous solid phases of CdS. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 14 - 27, pp. 9676 - 9682. RCS, 06/2012. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2012/CP/c2cp41273j#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.829
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 7
- 59** Jon M. Matxain; Mario Piris; Jon Uranga; Xabier Lopez; Gabriel Merino; Jesus M. Ugalde. The Nature of Chemical Bonds from PNOF5 Calculations. CHEMPHYSICHEM. 13 - 9, pp. 2297 - 2303. Wiley, 06/2012. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201200205/abstract>>. ISSN 1439-4235
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.349
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 16
- 60** Mario Piris; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. The extended Koopmans' theorem: Vertical ionization potentials from natural orbital functional theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 136 - 17, pp. 174116. AIP, 05/2012. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/136/17/10.1063/1.4709769>>. ISSN 0021-9606
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.164
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 26
- 61** Jon M. Matxain; Mario Piris; Jose M. Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. sp(3) Hybrid orbitals and ionization energies of methane from PNOF5. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 531, pp. 272 - 274. Elsevier, 04/2012. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261412002291>>. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.145
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 13
- 62** O. Lakuntza; J. M. Matxain; F. Ruiperez; M. Besora; F. Maseras; J. M. Ugalde; M. Schlangen; H. Schwarz. {A computational study on the intriguing mechanisms of the gas-phase thermal activation of methane by bare [Ni(H)(OH)](+)}. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 14 - 26, pp. 9306 - 9310. RSC, 02/2012.



Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2012/CP/c2cp23502a#!divAbstract>>. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.829

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 9

- 63** Xabier Lopez; Mario Piris; Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Jesus M. Ugalde. Natural Orbital Functional Theory and Reactivity Studies of Diradical Rearrangements: Ethylene Torsion as a Case Study. CHEMPHYSICHEM. 12 - 9, pp. 1673 - 1676. Wiley, 06/2011. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201100190/abstract>>. ISSN 1439-4235

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.412

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Atomic and Molecular Physics, and Optics

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 18

- 64** Xabier Lopez; Fernando Ruiperez; Mario Piris; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. Diradicals and Diradicaloids in Natural Orbital Functional Theory. CHEMPHYSICHEM. 12 - 6, pp. 1061 - 1065. Wiley, 04/2011. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.201100136/abstract>>. ISSN 1439-4235

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.412

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Atomic and Molecular Physics, and Optics

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 21

- 65** Elisa Jimenez-Izal; Jon M. Matxain; Mario Piris; Jesus M. Ugalde. Thermal Stability of Endohedral First-Row Transition-Metal TM@ZnSi Structures, i=12, 16. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 115 - 16, pp. 7829 - 7835. ACS Publishing, 04/2011. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp108640w>>. ISSN 1932-7447

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.805

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 3

- 66** Elixabete Rezabal; Juergen Gauss; Jon M. Matxain; Robert Berger; Martin Diefenbach; Max C. Holthausen. Quantum chemical assessment of the binding energy of CuO+. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 134 - 6, pp. 064304. AIP, 02/2011. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/134/6/10.1063/1.3537797>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.333

Fuente de citas: WOS

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 24

- 67** J. M. Matxain; M. Piris; X. Lopez; J. M. Ugalde. Complete basis set limit extrapolation calculations with PNOF3. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 499 - 1-3, pp. 164 - 167. Elsevier, 10/2010. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261410012145>>. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.280

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 11

- 68** Oier Lakuntza; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. Quantum Chemical Study of the Reaction between Ni⁺ and H₂S. CHEMPHYSICHEM. 11 - 14, pp. 3172 - 3178. Wiley, 10/2010. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.200901020/abstract>>. ISSN 1439-4235

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.339

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 3

- 69** Elena Formoso; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Darrin M. York. Molecular Dynamics Simulation of Bovine Pancreatic Ribonuclease A-CpA and Transition State-like Complexes. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 114 - 21, pp. 7371 - 7382. ACS Publications, 06/2010. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp909004y>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.603

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 15

- 70** Jon M. Matxain; Elixabete Rezabal; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde; Laura Gagliardi. Erratum: Quantum Monte Carlo study of the ground state and low-lying excited states of the scandium dimer (vol 128, 194315, 2008). JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 132 - 13, pp. 139901. AIP, 04/2010. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/132/13/10.1063/1.3372793>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 2.920**Fuente de citas:** WOS**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 6

- 71** Elisa Jimenez-Izal; Jon M. Matxain; Mario Piris; Jesus M. Ugalde. Structure and Stability of the Endohedrally Doped $(X@C_{di}Si)(i=4,9,12,15,16)(q=0,+/- 1)$, X = Na, K, Cl, Br, Nanoclusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 114 - 6, pp. 2476 - 2483. ACS Publishing, 02/2010. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp909357c>>. ISSN 1932-7447

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.524**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 8

- 72** M. Piris; J. M. Matxain; J. M. Ugalde. Piris natural orbital functional study of the dissociation of the radical helium dimer. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 129 - 1, 07/2008. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.166**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 15

- 73** Jon M. Matxain; Elixabete Rezabal; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde; Laura Gagliardi. Quantum Monte Carlo study of the ground state and low-lying excited states of the scandium dimer. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 128 - 19, pp. 194315. AIP, 05/2008. Disponible en Internet en: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/128/19/10.1063/1.2920480>>. ISSN 0021-9606

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.166**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 14

- 74** Jon M. Matxain; Elena Formoso; Jose M. Mercero; Mario Piris; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. Magnetic Endohedral Transition-Metal-Doped Semiconducting-Nanoclusters. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 14 - 28, pp. 8547 - 8554. Wiley, 2008. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200800376/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.454**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 7



- 75** Jon M. Matxain; Mario Piris; Elena Formoso; Jose M. Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. Endohedral stannaspherenes Mn@Sn-12 and its dimer: Ferromagnetic or antiferromagnetic?. CHEMPHYSICHEM. 8 - 14, pp. 2096 - 2099. Wiley, 10/2007. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.200700428/abstract>>. ISSN 1439-4235
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.449
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 18
- 76** Eider San Sebastian; Jon M. Matxain; Leif A. Eriksson; Roland H. Stote; Annick Dejaegere; Fernando P. Cossio; Xabier Lopez. Metal ion dependent adhesion sites in integrins: A combined DFT and QMC study on Mn²⁺. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 111 - 30, pp. 9099 - 9103. ACS Publications, 08/2007. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp071065s>>. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.115
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 1
- 77** Jon M. Matxain; Leif A. Eriksson; Elena Formoso; Mario Piris; Jesus M. Ugalde. Endohedral (X@ZnSi)(i)=(0,+/-)(4-16) nanoclusters, X = Li, Na, K, Cl, Br. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. 111 - 9, pp. 3560 - 3565. ACS Publications, 03/2007. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp0668697>>. ISSN 1932-7447
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.396
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 14
- 78** Jon M. Matxain; Mikael Ristila; Ake Strid; Leif A. Eriksson. Theoretical study of the antioxidant properties of pyridoxine. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 110 - 48, pp. 13068 - 13072. ACS Publications, 12/2006. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp065115p>>. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.047
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 50
- 79** Jon I. Mujika; Jon M. Matxain; Leif A. Eriksson; Xabier Lopez. Resonance structures of the amide bond: The advantages of planarity. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 12 - 27, pp. 7215 - 7224. Wiley, 09/2006. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200600052/abstract>>. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.015

Fuente de citas: WOS

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 47

- 80** Mikael Ristila; Jon M. Matxain; Ake Strid; Leif A. Eriksson. pH-dependent electronic and spectroscopic properties of pyridoxine (vitamin B-6). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 110 - 33, pp. 16774 - 16780. ACS Publications, 08/2006. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp062800n>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.115

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 31

- 81** JM Mercero; E Formoso; JM Matxain; LA Eriksson; JM Ugalde. {Sandwich complexes based on the "All-Metal"} Al-4(2-) aromatic ring}. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 12 - 17, pp. 4495 - 4502. Wiley, 06/2006. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.200600106/abstract>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.015

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 34

- 82** S Hamad; CRA Catlow; E Spano; JM Matxain; JM Ugalde. Structure and properties of ZnS nanoclusters. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 109 - 7, pp. 2703 - 2709. ACS Publications, 02/2005. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp0465940>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.033

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 94

- 83** JM Matxain; JM Mercero; A Irigoras; JM Ugalde. Discordant results on the FeO⁺⁺H⁻² reaction reconciled by quantum Monte Carlo theory. MOLECULAR PHYSICS. 102 - 23-24, pp. 2635 - 2637. Taylor & Francis, 12/2004. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1080/00268970412331292768>>. ISSN 0026-8976

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.406

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 16

- 84** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Clusters of II-VI materials: Cd_iX_i , $X = S, Se, Te$, $i \leq 16$. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 108 - 47, pp. 10502 - 10508. ACS Publications, 11/2004. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp037195s>>. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.639
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 47
- 85** JM Mercero; JM Matxain; E Rezabal; X Lopez; JM Ugalde. The first solvation shell of aluminum(III) and magnesium(II) cations in a protein model environment. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 98 - 4, pp. 409 - 424. Wiley, 06/2004. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.20075/abstract>>. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.392
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 19
- 86** JM Mercero; JI Mujika; JM Matxain; X Lopez; JM Ugalde. Incremental binding free energies of aluminum (III) vs. magnesium (II) complexes. CHEMICAL PHYSICS. 295 - 2, pp. 175 - 184. Elsevier, 12/2003. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010403004221>>. ISSN 0301-0104
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.070
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Citas: 11
- 87** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Clusters of group II-VI materials: Cd_iO_i ($i \leq 15$). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 107 - 46, pp. 9918 - 9923. ACS Publications, 11/2003. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp035226d>>. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.792
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Citas: 19
- 88** RP Diez; JA Alonso; JM Matxain; JM Ugalde. Electronic metastable bound states of $Mn-2(2+)$ and $Co-2(2+)$. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 372 - 1-2, pp. 82 - 89. Elsevier, 22/04/2003. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261403003658>>. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista



Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Fuente de citas: WOS

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 6

- 89** JM Mercero; JM Matxain; X Lopez; JE Fowler; JM Ugalde. Aluminum (III) interactions with the side chains of aromatic aminoacids. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 90 - 2, pp. 859 - 881. Wiley, 10/2002. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.952/abstract;jsessionid=45DC85438A9D65C42191726061E2F58C.f04t04>>. ISSN 0020-7608

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.514

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Citas: 16

- 90** JM Matxain; A Irigoras; JE Fowler; JM Ugalde. Electronic excitation energies of small ZnSi clusters. PHYSICAL REVIEW A. 63 - 1, pp. 013202. APS Journals, 11/12/2000. Disponible en Internet en: <<http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.63.013202>>. ISSN 1050-2947

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.810

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 3

- 91** J van de Bovenkamp; JM Matxain; FB van Duijneveldt; T Steiner. Combined ab initio computational and statistical investigation of a model C-H center dot center dot center dot O hydrogen bonded dimer as occurring in 1,4-benzoquinone. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 103 - 15, pp. 2784 - 2792. ACS Publications, 04/1999. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp983607z>>. ISSN 1089-5639

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.695

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Citas: 21

- 92** Elisa Jimenez Izal; Jesus M. Ugalde; Jon M. Matxain. Nanocluster-Assembled Materials. Computational Modeling of Inorganic Nanomaterials. 4, pp. 113 - 148. CRC Press, Taylor & Francis Group, 01/03/2016. ISBN 9781466576414

Tipo de producción: Capítulo de libro

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 3

Tipo de soporte: Libro

Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de capítulo de libro

Autor de correspondencia: Si



- 93** The one-electron picture in the Pirs Natural Orbital Functional 5 (PNOF5). 8TH CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA 2012): A CONFERENCE SELECTION FROM THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 5, pp. 5. Springer, 05/2014. ISBN 978-3-642-41271-4
Colección: Highlights in Theoretical Chemistry
Tipo de producción: Capítulo de libro
Posición de firma: 2
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 94** Jon M. Matxain Beraza. Small Clusters of II-VI Materials. UPV/EHU, 04/03/2003. ISBN 84-8373-461-3
Tipo de producción: Libro o monografía científica
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Libro
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de libro completo
Publicación relevante: Si
- 95** Fernando Ruipérez; Jon M. Matxain. Dynamic Chemistry in Polymer Science. Polymers. MDPI, Disponible en Internet en: <https://www.mdpi.com/journal/polymers/special_issues/Dynamic>.
Tipo de producción: Edición científica
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Editor/a o coeditor/a
Nº total de autores: 2

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Unexpected Properties due to Chirality (specular symmetry) in Chemistry
Nombre del congreso: Symmetry - Art and Science 2019
Tipo evento: Congreso
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Kanazawa, Japón
Fecha de celebración: 25/11/2019
Fecha de finalización: 30/11/2019
Entidad organizadora: Kanazawa Institute of Technology
Tipo de entidad: Universidad
"Unexpected Properties due to Chirality (specular symmetry) in Chemistry".
- 2** **Título del trabajo:** Computational-Experimental Development of Self-Healing Polymers with Dichalcogenide Cross-Links
Nombre del congreso: TCCM20
Tipo evento: Congreso
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 30/05/2019
Fecha de finalización: 01/06/2019
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco
Tipo de entidad: Universidad
- 3** **Título del trabajo:** Computational-Experimental Development of Self-Healing Polymers with Dichalcogenide Cross-Links
Nombre del congreso: XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo evento: Congreso
Ámbito geográfico: Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 26/05/2019



Fecha de finalización: 30/05/2019

Entidad organizadora: Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** Asociación

- 4** **Título del trabajo:** Theoretical Self-Healing Capacity of Polymers with Disulfide Cross-links
Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2018)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 17/07/2018
Fecha de finalización: 19/07/2018
Entidad organizadora: Universidad Autónoma de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 5** **Título del trabajo:** Transition Metal Doped Endohedral TM@Zn₁₂S₁₂ Nanoparticles
Nombre del congreso: 16th International Congress of Quantum Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Menton, Francia
Fecha de celebración: 18/06/2018
Fecha de finalización: 23/06/2018
Entidad organizadora: International Academy of Quantum Molecular Science
- 6** **Título del trabajo:** Theoretical Self-Healing Capacity of Polymers with Disulfide Cross-links
Nombre del congreso: 2nd International Caparica Christmas Congress on Translational Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Lisboa, Portugal
Fecha de celebración: 04/12/2017
Fecha de finalización: 07/12/2017
Entidad organizadora: Universidade Nova de Lisboa
Jon M. Matxain.
- 7** **Título del trabajo:** Transition Metal Doped Magnetic Zn₁₂S₁₂ Nanoparticles
Nombre del congreso: 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2017)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Munich, Alemania
Fecha de celebración: 26/08/2017
Fecha de finalización: 01/09/2017
Entidad organizadora: Asociación Mundial de Químicos Teóricos (WATOC)
Jon M. Matxain.
- 8** **Título del trabajo:** Magnetic endohedral TM@Zn₁₂S₁₂ nanoclusters: A predictive work
Nombre del congreso: From Bioinorganic Chemistry to Catalysis
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Donostia, España

Fecha de celebración: 06/06/2017

Fecha de finalización: 06/06/2017

Entidad organizadora: Donostia International
Physics Center
Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Centro de Investigación

9 Título del trabajo: Computational Chemistry Applied to: Nanoclusters, Polymers and Biochemistry

Nombre del congreso: Transborder Theoretical Chemistry Days

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Unión Europea

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Burdeos, Francia

Fecha de celebración: 09/11/2016

Fecha de finalización: 10/11/2016

Entidad organizadora: University of Bordeaux
Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Universidad

10 Título del trabajo: Disulfide-based organic compounds for the design of improved self-healing materials

Nombre del congreso: Energy, Materials and Nanotechnology Meeting (EMN Theory)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Las Vegas, Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 10/10/2016

Fecha de finalización: 14/10/2016

Entidad organizadora: EMN
Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Entidad Empresarial

11 Título del trabajo: Aluminum and Aluminum-Gold Nanoparticles

Nombre del congreso: 10th conference on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Castelló, España

Fecha de celebración: 28/06/2016

Fecha de finalización: 01/07/2016

Entidad organizadora: Universitat Jaume I
Jon M. Matxain.

12 Título del trabajo: IPolymorphs. Novel Routes to Inorganic Polymorphs

Nombre del congreso: IPolymorphs. Novel Routes to Inorganic Polymorphs

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Organizativo - Presidente Comité

Ciudad de celebración: Donostia, España

Fecha de celebración: 28/06/2016

Fecha de finalización: 01/07/2016

Entidad organizadora: Donostia International
Physics Center
Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Centro de Investigación

13 Título del trabajo: Disulfide-based organic compounds for the design of improved self-healing materials

Nombre del congreso: 251st American Chemistry Society National Meeting

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: San Diego, Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 13/03/2016

Fecha de finalización: 17/03/2016

Entidad organizadora: Amecan Chemical Society **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Jon M. Matxain.

14 Título del trabajo: Attack of OH radical to the OH- and S- containing amino acids

Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2015 (Theobio 15)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Cagliari, Italia

Fecha de celebración: 08/06/2015

Fecha de finalización: 12/06/2015

Entidad organizadora: Universidad de Cagliari **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

15 Título del trabajo: Novel Solid Polymorphs by self assembling of nanoclusters

Nombre del congreso: ImagineNano2015

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Bilbao, País Vasco, España

Fecha de celebración: 10/03/2015

Fecha de finalización: 13/03/2014

Entidad organizadora: Donostia International **Tipo de entidad:** Centro de Investigación
Physics Center
Jon M. Matxain.

16 Título del trabajo: Novel Solid Polymorphs by self assembling of nanoclusters

Nombre del congreso: 10th Triennial congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC 2014

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, Galicia, España

Fecha de celebración: 05/10/2014

Fecha de finalización: 10/10/2014

Entidad organizadora: Asociación Mundial de **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Químicos Teóricos y Computacionales (WATOC)
Jon M. Matxain.

17 Título del trabajo: Nanocluster assembled materials

Nombre del congreso: Materials Science 2013

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Las Vegas, Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 07/10/2013

Fecha de finalización: 09/10/2013

Entidad organizadora: OMICS group **Tipo de entidad:** Grupo Editorial
Jon M. Matxain.



- 18** **Título del trabajo:** Study of the attack of OH radicals on aromatic amino acids
Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2013 (Theobio 13)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Gotteborg, Suecia
Fecha de celebración: 24/06/2013
Fecha de finalización: 27/06/2013
Entidad organizadora: Universidad de Gotteborg **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 19** **Título del trabajo:** Nature of chemical bonds by means of PNOF theory
Nombre del congreso: Congreso de Qumicos Teóricos de expresión latina (QUITEL 2011)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Riviera Maya, México
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/12/2011
Entidad organizadora: CINVESTAV **Tipo de entidad:** Centro de I+D
Jon M. Matxain.
- 20** **Título del trabajo:** Study of the attack of the OH and NO radicals to the protein backbone
Nombre del congreso: Electronic Structure: Princliplies and applications ESPA 2012
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, Cataluña, España
Fecha de celebración: 04/12/2011
Fecha de finalización: 09/12/2011
Entidad organizadora: Universitat Autònoma de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 21** **Título del trabajo:** Simulating materials. Quantum and atomistic scale simulations
Nombre del congreso: 9th Triennial congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists. WATOC 2011
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Otros
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, Galicia, España
Fecha de celebración: 17/07/2011
Fecha de finalización: 22/07/2011
Entidad organizadora: Asociación Mundial de Químicos Teóricos y Computacionales (WATOC) **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Jon M. Matxain.
- 22** **Título del trabajo:** Simulating materials. Quantum and atomistic scale simulations
Nombre del congreso: Second international workshop on multiphysics, multiscale and optimization problems
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Leioa, España
Fecha de celebración: 06/06/2011
Fecha de finalización: 07/06/2011



Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

- 23** **Título del trabajo:** Symmetric assembling modes of polyhedral building blocks
Nombre del congreso: Symmetry Conference (ISIS 2010)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Gmuend, Austria
Fecha de celebración: 23/08/2010
Fecha de finalización: 28/08/2010
Entidad organizadora: ISIS Symmetry **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Jon M. Matxain.
- 24** **Título del trabajo:** Endohedral compounds of hollow ZnS nanostructures
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2010
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, Principado de Asturias, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Fecha de finalización: 03/07/2010
Entidad organizadora: Universidad de Oviedo **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 25** **Título del trabajo:** Endohedral compounds of Hollow ZnS nanostructures
Nombre del congreso: ICCMSE Conference
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Rodas, Grecia
Fecha de celebración: 09/2009
Entidad organizadora: Universidad de Atenas **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 26** **Título del trabajo:** ZnS nanoclusters in biological environment
Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2009 (Theobio 09)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Roscoff, Francia
Fecha de celebración: 06/2009
Entidad organizadora: Universidad de Paris **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 27** **Título del trabajo:** Thermally stable solids based on endohedrally doped ZnS nanoclusters
Nombre del congreso: Molecular Informatics and Bioinformatics (MolInfBioInf 09)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 03/2009
Entidad organizadora: Universidad de Budapest **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.



- 28** **Título del trabajo:** Magnetic endohedral transition metal doped semiconducting nanoclusters
Nombre del congreso: 19 Conferencia de Química
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Santiago de Cuba, Cuba
Fecha de celebración: 12/2008
Entidad organizadora: Universidad de Oriente **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 29** **Título del trabajo:** Nobel building blocks for Molecular solids and Spintronics?
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2008
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, Illes Balears, España
Fecha de celebración: 09/2008
Entidad organizadora: Universidad de las Islas **Tipo de entidad:** Universidad
Baleares
Jon M. Matxain.
- 30** **Título del trabajo:** Magnetic endohedral transition metal doped semiconducting nanoclusters
Nombre del congreso: Molecular Informatics and Bioinformatics (MolInfBioInf 08)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Budapest, Hungría
Fecha de celebración: 03/2008
Entidad organizadora: Universidad de Budapest **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 31** **Título del trabajo:** Mn@Sn₁₂ stannaspherene dimer. Ferromagnetic or Antiferromagnetic?
Nombre del congreso: Trends in Nanotechnology 2007 (TNT 07)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Donostia, España
Fecha de celebración: 09/2007
Entidad organizadora: Donostia International **Tipo de entidad:** Centro de Investigación
Physics Center
Jon M. Matxain.
- 32** **Título del trabajo:** Antioxidant properties of pyridoxine
Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2007 (Theobio 07)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Cetraro, Italia
Fecha de celebración: 06/2007
Entidad organizadora: Universidad de Calabria **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.
- 33** **Título del trabajo:** Structure and optical properties of ZnS nanoclusters
Nombre del congreso: ASEVA workshop 19
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)



Ciudad de celebración: Avila, Castilla y León, España

Fecha de celebración: 09/2006

Entidad organizadora: Asociación española del vacío ASEVA

Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Asociaciones y Agrupaciones

34 Título del trabajo: Theoretical study of the antioxidant properties of pyridoxine

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2006

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, Galicia, España

Fecha de celebración: 07/2006

Entidad organizadora: Universidad de Santiago de Compostela

Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Universidad

35 Título del trabajo: Electronic excitation energies of ZnS nanoparticles

Nombre del congreso: Nanospain 2006

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Pamplona, España

Fecha de celebración: 03/2006

Entidad organizadora: Nanospain

Ciudad entidad organizadora: España

Jon M. Matxain.

36 Título del trabajo: Diffusion Monte Carlo applied to photochemical problems

Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2005 (THEOBIO 05)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Örebro, Suecia

Fecha de celebración: 29/06/2005

Fecha de finalización: 02/07/2005

Entidad organizadora: University of Örebro

Ciudad entidad organizadora: örebro, Suecia

Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Universidad

37 Título del trabajo: Discordant results on the FeO+ + H2 reaction reconciled by Quantum Monte Carlo theory

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2004

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Valladolid, Castilla y León, España

Fecha de celebración: 09/2004

Entidad organizadora: Universidad de Valladolid

Jon M. Matxain.

Tipo de entidad: Universidad

38 Título del trabajo: Equipo organizador

Nombre del congreso: Theoretical Biophysics 2003 (THEOBIO 03)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Organizativo - Otros



Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España

Fecha de celebración: 03/2003

Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

39 Título del trabajo: Small clusters of II-VI materials
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2002
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Sevilla, Andalucía, España
Fecha de celebración: 09/2002
Entidad organizadora: Universidad de Sevilla **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

40 Título del trabajo: Equipo organizador
Nombre del congreso: One-day workshop on Physical Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Organizativo - Otros
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 05/07/2001
Fecha de finalización: 05/07/2001
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

41 Título del trabajo: Small clusters of II-VI materials: Zn_iS_i, i=1-9,12,15. Structure characterization and excitation energies
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) 2000
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 10/2000
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

42 Título del trabajo: Equipo organizador
Nombre del congreso: International conference on electron densities and electron distributions
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Organizativo - Otros
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 04/2000
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.

43 Título del trabajo: Equipo organizador
Nombre del congreso: International Workshop on Electronic Structure: Prediction and Applications II
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Organizativo - Otros
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Fecha de celebración: 06/1999
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Jon M. Matxain.



- 44** **Título del trabajo:** How strong are hydrogen bonds in benzoquinone crystals?
Nombre del congreso: Undergraduate research in chemistry. PAC symposium '98
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Holanda
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Leiden, Holanda
Fecha de celebración: 03/1998
Entidad organizadora: PAC **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Ciudad entidad organizadora: Amsterdam, Holanda
Jon M. Matxain.
- 45** **Título del trabajo:** How strong are hydrogen bonds in benzoquinone crystals?
Nombre del congreso: Stichting Scheikundig Onderzoek in Nederland (SON), Werkgemeenschap voor spectroscopie en theorie
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Holanda
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lunteren, Holanda
Fecha de celebración: 02/1998
Entidad organizadora: The Royal Netherlands Chemical Society **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Ciudad entidad organizadora: Amsterdam, Holanda

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Organización de actividades de I+D+i

- 1** **Título de la actividad:** Euskal Esperientziak Zientzia Zabalkuntzan
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito geográfico:** Autonómica
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Entidad convocante: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad convocante: Donostia, País Vasco, España
Modo de participación: Organizador
Fecha de inicio-fin: 14/06/2018 - 15/06/2018 **Duración:** 2 días
- 2** **Título de la actividad:** iPolymorphs
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito geográfico:** Mundial
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Entidad convocante: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad convocante: Donostia, País Vasco, España
Modo de participación: Organizador
Fecha de inicio-fin: 22/06/2016 - 24/06/2016 **Duración:** 3 días
- 3** **Título de la actividad:** Computation of Electronic Excited States
Tipo de actividad: Summer School **Ámbito geográfico:** Mundial
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Entidad convocante: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad convocante: Donostia, País Vasco, España
Modo de participación: Organizador
Fecha de inicio-fin: 01/09/2015 - 04/09/2015 **Duración:** 4 días



- 4** **Título de la actividad:** International conference on Electron densities and electron distributions
Tipo de actividad: Congreso Internacional **Ámbito geográfico:** Mundial
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Entidad convocante: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad convocante: Donostia, País Vasco, España
Modo de participación: Co-organizador
Fecha de inicio-fin: 01/04/2000 - 04/04/2000 **Duración:** 3 días
- 5** **Título de la actividad:** International Workshop on Electronic Structure: Predictions and Applications II
Tipo de actividad: Workshop **Ámbito geográfico:** Mundial
Ciudad de celebración: Donostia, País Vasco, España
Entidad convocante: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad convocante: Donostia, País Vasco, España
Modo de participación: Co-organizador
Fecha de inicio: 06/1999 **Duración:** 1 día

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Universitat de Girona **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Instituto Universitario de Química Computacional
Ciudad entidad realización: Girona, Holanda
Primaria (Cód. Unesco): 230226 - Bioquímica física
Fecha de inicio-fin: 16/01/2013 - 20/01/2013 **Duración:** 5 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- 2** **Entidad de realización:** Universidad de Örebro **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Naturales
Ciudad entidad realización: Örebro, Suecia
Primaria (Cód. Unesco): 230226 - Bioquímica física
Fecha de inicio-fin: 01/01/2005 - 31/12/2006 **Duración:** 2 años
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
- 3** **Entidad de realización:** Universidad de Cambridge
Facultad, instituto, centro: Cavendish Laboratory
Ciudad entidad realización: Utrecht, Holanda
Primaria (Cód. Unesco): 230226 - Bioquímica física
Fecha de inicio-fin: 01/07/2001 - 30/09/2001 **Duración:** 3 meses
Objetivos de la estancia: Estancia Predoctoral
- 4** **Entidad de realización:** Universidad Jaime I **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Castellon, Comunidad Valenciana, España
Primaria (Cód. Unesco): 230226 - Bioquímica física
Fecha de inicio-fin: 24/01/2000 - 22/02/2000 **Duración:** 1 mes
Objetivos de la estancia: Estudiante



- 5** **Entidad de realización:** Universidad de Utrecht
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
Ciudad entidad realización: Utrecht, Holanda
Primaria (Cód. Unesco): 230226 - Bioquímica física
Fecha de inicio-fin: 01/09/1996 - 30/06/1998 **Duración:** 1 año - 10 meses
Objetivos de la estancia: Estudiante

Ayudas y becas obtenidas

- 1** **Nombre de la ayuda:** Ayuda a la realización de cursos de doctorado en otra universidad
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 01/01/2000 **Duración:** 1 mes
Entidad de realización: Universidad Jaime I
- 2** **Nombre de la ayuda:** Beca Predoctoral
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 01/10/1998 **Duración:** 4 años
Entidad de realización: Universidad del País Vasco
Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas
- 3** **Nombre de la ayuda:** Beca Erasmus
Finalidad: Erasmus
Entidad concesionaria: Union Europea **Tipo de entidad:** publico
Fecha de concesión: 01/09/1996 **Duración:** 1 año
Entidad de realización: Universidad de Utrecht
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química

Premios, menciones y distinciones

- 1** **Descripción:** Premio Especial Martin Guzmán
Entidad concesionaria: Rotary Club **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
Ciudad entidad concesionaria: Donostia, País Vasco, España
Fecha de concesión: 2004
- 2** **Descripción:** Premio Extraordinario de Doctorado
Entidad concesionaria: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 2003



Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

- 1** **Descripción:** Evaluación positiva Acreditación I3
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva
Fecha del reconocimiento: 18/01/2013
Tipo de entidad: Agencia estatal
- 2** **Descripción:** Evaluación positiva Personal Doctor Investigador
Entidad acreditante: UNIBASQ
Fecha del reconocimiento: 09/10/2012
- 3** **Descripción:** Evaluación positiva Profesor Adjunto
Entidad acreditante: UNIBASQ
Fecha del reconocimiento: 09/10/2012
- 4** **Descripción:** Evaluación positiva Profesor Agregado
Entidad acreditante: UNIBASQ
Fecha del reconocimiento: 09/10/2012
- 5** **Descripción:** Evaluación positiva Profesor Ayudante Doctor
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación
Fecha del reconocimiento: 13/04/2004
Tipo de entidad: Agencia Estatal