



Elixabete Rezabal

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 31/03/2022

v 1.4.3

a282ca26dd517b48ee6d03fac4af7ba8

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.

Dr. Rezabal carried out her **PhD** from 2003 to 2007 under the guidance of Prof. J.M. Ugalde, in the Theoretical Chemistry group of the UPV/EHU (Spain). Her thesis, entitled "Aluminium in protein model environments: affinity and coordination", unveiled the basic principles governing the uptake and transportation of Al(III) in living systems and the toxic effects it exerts in the organisms. This work, and the research line opened with it, resulted in 10 publications related with **Al(III) biochemistry**, also in collaboration with international groups.

Her **postdoctoral stage** is characterised by the diverse research environments, chemical problems addressed, and techniques applied:

-2008-2011, Frankfurt University, Germany (Prof. Max C. Holthausen). Efforts were dedicated to the elucidation of copper biochemical reactivity by **DFT and post-HF** techniques, in close collaboration with Prof. Roithova's experimental group (Charles University, Prague).

-2011-2013, POLYMAT (UPV/EHU), Spain (Prof. Thomas Schäfer). As part of the multidisciplinary NanoBioSeparations group, stimuli responsive materials and the field of ionic liquids were studied by **classical and ab initio molecular dynamics**.

-2013-2015, Laboratoire de Chimie Moléculaire in École Polytechnique de Palaiseau, France (Prof. G. Frison). By means of **topological and bond electron decomposition analysis** methods, electronic and physicochemical properties of one of the most used building blocks of the ILs, the N-Heterocyclic carbenes were unveiled, contributing to the comprehension of their ligand properties in transition metal catalysts, in collaboration with the laboratory of Prof. N. Mezaïlles (Université Paul Sabatier, France).

In summary, during these years, Dr. Rezabal addressed different systems related to **metallorganic reactivity** and **non-conventional solvents**, acquiring a deep knowledge of a wide variety of computational chemistry methods needed to address complex chemical problems. Furthermore, she gained a vast international experience in working with researchers coming from different backgrounds and building up new research lines and collaborations.

In 2015, Dr. Rezabal obtained an **Assistant Professor** position in the Physical Chemistry Department of the EHU/UPV, which was in 2018 transferred to the Polymers and Advanced Materials Department of the same university. Here she could incorporate back to the Theoretical Chemistry group led by Prof. Jesus Ugalde in the EHU/UPV and DIPC, where she works in two main research lines: on one hand she leads the investigation of the **solvent properties of non conventional solvents** as ionic liquids and deep eutectic solvents; besides, she has focused her efforts on the **design of transition metal-based anticancer prodrugs**, in collaboration with the group of Prof. Luca Salassa. In 2021, she became **Associate Professor**.



Indicadores generales de calidad de la producción científica

Información sobre el número de sexenios de investigación y la fecha del último concedido, número de tesis doctorales dirigidas en los últimos 10 años, citas totales, promedio de citas/año durante los últimos 5 años (sin incluir el año actual), publicaciones totales en primer cuartil (Q1), índice h. Incluye otros indicadores considerados de importancia.

Total citations in WOS: 450 (411 without self-citations). Publications in peer-reviewed international JCR journals: 33

Total citations in Scopus: 459 Total documents published: 32

Elixabete Rezabal

Apellidos: **Rezabal**
Nombre: **Elixabete**
DNI: **44149767W**
ORCID: **0000-0003-0397-6140**
ResearcherID: **X-6011-2019**
Fecha de nacimiento: **01/12/1980**
Sexo: **Mujer**
Teléfono fijo: **(+34) 943015408**
Correo electrónico: **elixabete.rezabal@ehu.eus**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Polímeros y materiales avanzados: física, química y tecnología, Facultad de Química
Categoría profesional: Profesora titular de universidad
Fecha de inicio: 02/10/2021
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad del País Vasco	Profesor laboral interino de universidad	20/07/2021
2	Universidad del País Vasco	Profesora adjunta	29/01/2018
3	Universidad del País Vasco	Profesora adjunta	17/12/2015
4	Universidad del País Vasco	Profesora laboral interina	21/09/2015
5	Universidad del País Vasco	Investigadora doctora ley ciencia	15/09/2015
6	Ecole Polytechnique/CNRS	Investigador postdoctoral	15/04/2013
7	POLYMAT (UPV/EHU)	Investigador postdoctoral	01/02/2011
8	University of Frankfurt	Investigador postdoctoral	16/01/2008
9	Universidad del País Vasco	Investigadora predoctoral	26/11/2003

1 Entidad empleadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad Vasco
Categoría profesional: Profesor laboral interino de universidad
Fecha de inicio-fin: 20/07/2021 - 01/10/2021

2 Entidad empleadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad Vasco
Departamento: Polímeros y materiales avanzados: física, química y tecnología, Facultad Química
Categoría profesional: Profesora adjunta



Fecha de inicio-fin: 29/01/2018 - 19/07/2021
Modalidad de contrato: Contrato laboral temporal

- 3 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Profesora adjunta
Fecha de inicio-fin: 17/12/2015 - 28/01/2018
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 2 años - 1 mes - 5 días
- 4 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Profesora laboral interina
Fecha de inicio-fin: 21/09/2015 - 16/12/2015
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 2 meses - 25 días
- 5 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigadora doctora ley ciencia
Fecha de inicio-fin: 15/09/2015 - 20/09/2015
Tipo de entidad: Universidad
- 6 Entidad empleadora:** Ecole Polytechnique/CNRS
Categoría profesional: Investigador postdoctoral
Fecha de inicio-fin: 15/04/2013 - 30/06/2015
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 2 años - 2 meses - 15 días
- 7 Entidad empleadora:** POLYMAT (UPV/EHU)
Categoría profesional: Investigador postdoctoral
Fecha de inicio-fin: 01/02/2011 - 14/04/2013
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 2 años - 3 meses
- 8 Entidad empleadora:** University of Frankfurt
Categoría profesional: Investigador postdoctoral
Fecha de inicio-fin: 16/01/2008 - 15/01/2011
Tipo de entidad: Universidad
Duración: 3 años
- 9 Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigadora predoctoral
Fecha de inicio-fin: 26/11/2003 - 31/01/2008
Tipo de entidad: Universidad



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: 04/09/2003

Doctorados

Programa de doctorado: Programa Oficial de Doctorado en Química Teórica y Computacional

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

Fecha de titulación: 14/12/2007

Cursos y seminarios recibidos de perfeccionamiento, innovación y mejora docente, nuevas tecnologías, etc., cuyo objetivo sea la mejora de la docencia

1 Título del curso/seminario: DOITU

Objetivos del curso/seminario: Formación del profesorado universitario en la planificación de la docencia y preparación del cuaderno del estudiante

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

Facultad, instituto, centro: Programa de formación docente del profesorado universitario

Duración en horas: 50 horas

Fecha de inicio-fin: 01/09/2017 - 30/12/2017

2 Título del curso/seminario: Taller de aplicación de metodologías activas

Objetivos del curso/seminario: Formación del profesorado universitario en la aplicación de metodologías activas a la docencia.

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

Facultad, instituto, centro: Programa de formación docente del profesorado universitario

Duración en horas: 25 horas

Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 30/05/2017

3 Título del curso/seminario: eGela: herramientas fundamentales

Objetivos del curso/seminario: Formación del profesorado universitario en el uso de las herramientas del aula virtual de la universidad.

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

Facultad, instituto, centro: Programa de formación docente del profesorado universitario

Duración en horas: 16 horas

Fecha de inicio-fin: 01/06/2016 - 30/06/2016



Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Alemán	A1	A1	A1	A1	A1
Francés	C1	C1	C1	C1	C1
Inglés	C1	C1	C1	C1	C1
Italiano	C1	C1	C1	C1	C1
Español	C2	C2	C2	C2	C2
Euskera	C2	C2	C2	C2	C2

Actividad docente

Formación académica impartida

- 1 Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Técnicas instrumentales
Tipo de docencia: Teórica presencial
Tipo de asignatura: Obligatoria
Titulación universitaria: Grado en Farmacia
Fecha de inicio: 01/09/2015 **Fecha de finalización:** 31/01/2018
Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 9
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Facultad de Farmacia
Departamento: Departamento de química física
Idioma de la asignatura: Euskera
- 2 Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química General
Tipo de asignatura: Obligatoria
Titulación universitaria: Grado en ciencia y tecnología de los alimentos
Fecha de inicio: 01/09/2015 **Fecha de finalización:** 18/01/2018
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 Farmacia
Departamento: Departamento de química física
Idioma de la asignatura: Euskera
- 3 Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química de la Atmósfera
Tipo de asignatura: Optativa
Titulación universitaria: Grado en ciencias medioambientales
Fecha de inicio: 01/09/2016 **Fecha de finalización:** 31/07/2017
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 Farmacia

Departamento: Departamento de química física

Idioma de la asignatura: Euskera

4 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Experimentación en Química Física

Tipo de docencia: Prácticas de Laboratorio

Tipo de asignatura: Obligatoria

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 31/01/2018

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: Departamento de ciencia y tecnología de polímeros

Idioma de la asignatura: Inglés

5 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física I

Tipo de docencia: Teórica presencial

Tipo de asignatura: Obligatoria

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 31/01/2018

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: Departamento de ciencia y tecnología de polímeros

Idioma de la asignatura: Español

6 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física II

Tipo de docencia: Prácticas de Laboratorio

Tipo de asignatura: Obligatoria

Titulación universitaria: Grado en Química

Fecha de inicio: 31/01/2018

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 5

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

Facultad, instituto, centro: Facultad de Ciencias Químicas

Departamento: Departamento de ciencia y tecnología de polímeros

Idioma de la asignatura: Euskera



Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1 Título del trabajo:** Structural and conformational study of FMN-containing miniSOG
Tipo de proyecto: Trabajo de fin de Master
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Oksana Azpitarte Agirre
Calificación obtenida: 8
Fecha de defensa: 22/09/2020
- 2 Título del trabajo:** Degradación de la lignina por medio de DES basados en ácido láctico y cloruro de colina
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Enara Aldai
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 16/09/2019
- 3 Título del trabajo:** Estudio de la activación de prodrogas mediante la riboflavina
Codirector/a tesis: Jose Javier Lopez Pestaña
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Beñat Olabarrieta
Calificación obtenida: 7,3
Fecha de defensa: 16/09/2019
- 4 Título del trabajo:** Estudio Computacional de complejos areno-Ru fotoactivables
Tipo de proyecto: Proyecto Final de Carrera
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Oksana Azpitarte
Calificación obtenida: 9.1
Fecha de defensa: 12/07/2018
- 5 Título del trabajo:** Estudio de la activación de prodrogas mediante la riboflavina
Tipo de proyecto: Proyecto Final de Carrera
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Alumno/a: Manex Iribar
Calificación obtenida: 7.8
Fecha de defensa: 12/07/2018



Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

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

- 1** **Nombre del proyecto:** Catalysis towards metal substrates and its application in medicinal inorganic chemistry
Entidad de realización: Donostia International Physics Center **Tipo de entidad:** BERC
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Luca Salassa
Nº de investigadores/as: 3
Fecha de inicio-fin: 2019 - 2022
Cuantía total: 103.000 €
- 2** **Nombre del proyecto:** Kimika Teorikoa. Avances en Química Cuántica: Avances teóricos y aplicación en bioquímica computacional, nanociencia y materiales poliméricos
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus Ugalde
Nº de investigadores/as: 19
Entidad/es financiadora/s: Gobierno Vasco **Tipo de entidad:** Gobierno Vasco
Ciudad entidad financiadora: España
Fecha de inicio-fin: 2019 - 2021
Cuantía total: 254.714 €
- 3** **Nombre del proyecto:** Nanomateriales de conversión ascendente para quimioterapia fotocatalítica con complejos de metales de transición
Entidad de realización: Donostia International Physics Center **Tipo de entidad:** Fundación
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Luca Salassa
Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 31/12/2019
Cuantía total: 70.000 €
- 4** **Nombre del proyecto:** LION: Líquidos iónicos como solución innovadora para una economía sostenible en Euskadi
Entidad de realización: Donostia International Physics Center **Tipo de entidad:** Research Center
Nº de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s: ELKARTEK- Gobierno Vasco
Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 31/12/2018
Cuantía total: 33.454,44 €



- 5** **Nombre del proyecto:** Mezclas y materiales híbridos de base polimérica
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2018
Cuantía total: 236.378 €
- 6** **Nombre del proyecto:** Química cuántica, bioquímica computacional, nanotecnología, explosiones culómbicas, teoría del funcional de orbitales naturales
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2018
Cuantía total: 401.598 €
- 7** **Nombre del proyecto:** IPES-Innovative polymers for energy storage
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Fecha de inicio-fin: 01/12/2012 - 30/11/2017
Cuantía total: 1.430.239 €
- 8** **Nombre del proyecto:** LISOL: Soluciones basadas en Líquidos iónicos para diversificar las oportunidades de la industria vasca
Modalidad de proyecto: De investigación industrial
Entidad de realización: POLYMAT **Tipo de entidad:** Centro de I+D
Entidad/es financiadora/s:
ELKARTEK- Gobierno Vasco
Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 31/12/2016
Cuantía total: 136.579,1 €
- 9** **Nombre del proyecto:** Renaissance-Training network in innovative polyelectrolytes for energy and environment
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Fecha de inicio-fin: 01/05/2012 - 30/06/2016
Cuantía total: 788.079 €
- 10** **Nombre del proyecto:** "Chiracid" An alternative Design for Chiral Bronsted Acid Organocatalysis
Entidad de realización: Ecole Polytechnique-CNRS **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Palaiseau, Île de France, Francia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jean François Betzer; Gilles Frison
Entidad/es financiadora/s:
Agence National de la Recherche **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2014
Cuantía total: 386.672 €
- 11** **Nombre del proyecto:** "DiPhoNi" Diphosphine Nickel (0): one metallic fragment for three applications
Entidad de realización: Ecole Polytechnique-CNRS **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Palaiseau, Île de France, Francia
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Nicolas Mezailles; Gilles Frison
Entidad/es financiadora/s:
Agence national de recherche **Tipo de entidad:** Agencia Estatal



Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2014

Cuantía total: 421.466 €

12 Nombre del proyecto: "MATRIX" Mixed-Matrix Interfaces for Enhanced Fine Chemicals Downstream Processing and Monitoring

Entidad de realización: Polymat (UPV/EHU)

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Thomas Schäfer

Entidad/es financiadora/s:

European Research Council

Tipo de entidad: Organismo Público de Investigación

Fecha de inicio-fin: 01/08/2008 - 31/07/2013

Cuantía total: 1.498.000 €

13 Nombre del proyecto: Nanoquímica, bioquímica/biofísica computacional

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

Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España

Fecha de inicio-fin: 01/01/2007 - 31/12/2012

Cuantía total: 438.176 €

14 Nombre del proyecto: Quantum chemical investigations on copper-mediated hydroxylation reactions

Entidad de realización: University of Frankfurt

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Max C. Holthausen

Entidad/es financiadora/s:

Hessen federal state

Tipo de entidad: Agencia Estatal

Ciudad entidad financiadora: Frankfurt, Alemania

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 01/01/2011

15 Nombre del proyecto: Quantum chemical investigations on transition metal catalyzed bleaching processes in washing detergents

Entidad de realización: University of Frankfurt

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: Frankfurt, Alemania

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Max C. Holthausen

Entidad/es financiadora/s:

Henkel KGaA

Tipo de entidad: Entidad Empresarial

Fecha de inicio-fin: 01/01/2008 - 01/01/2009

16 Nombre del proyecto: Aplicaciones de la Química Cuántica a Problemas Químicos seleccionados

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

Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España

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

Entidad/es financiadora/s:

Dirección general de investigación. Ministerio de Ciencia y Tecnología

Tipo de entidad: Publico

Fecha de inicio-fin: 01/01/2005 - 31/12/2007

Cuantía total: 131.000 €



17 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria
Entidad/es financiadora/s:
Dirección general de investigación. Ministerio de Ciencia y Tecnología **Tipo de entidad:** Publico
Fecha de inicio-fin: 01/01/2002 - 31/12/2004
Cuantía total: 91.233 €

18 Nombre del proyecto: Avances en Química Cuántica
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria
Entidad/es financiadora/s:
Gobierno Vasco **Tipo de entidad:** Publico
Ciudad entidad financiadora: España
Fecha de inicio-fin: 01/01/2001 - 31/12/2004
Cuantía total: 143.000 €

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

- 1 Índice H:** 14
Fecha de aplicación: 18/01/2022
Fuente de Índice H: WOS
- 2 Índice H:** 16
Fecha de aplicación: 18/01/2022
Fuente de Índice H: GOOGLE SCHOLAR
- 3 Índice H:** 14
Fecha de aplicación: 18/01/2022
Fuente de Índice H: SCOPUS

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Stefano Scoditti; Eslam Dabbish; German E Pieslinger; Elixabete Rezabal; Xabier Lopez; Emilia Sicilia. Flavin-mediated photoactivation of Pt(IV) anticancer complexes: computational insights on the catalytic mechanism. Phys. Chem. Chem. Phys.2022.
DOI: 10.1039/D1CP05507K
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 2** Jon Zubeltzu; Jon M. Matxain; Elixabete Rezabal. Computational approach to (ZnS)_i nanoclusters in ionic liquids. PHYSICAL REVIEW E. 104 - 2, pp. 024604. 2021.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.024604>

Tipo de producción: Artículo científico**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.529**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Mathematical physics**Revista dentro del 25%:** Si

- 3** Juan Gurruchaga-Pereda 1; Virginia Martínez-Martínez; Elena Formoso; Oksana Azpitarte; Elixabete Rezabal; Lopez; Cortajarena; Salassa. Enhancing the Photocatalytic Conversion of Pt(IV) Substrates by Flavoprotein Engineering. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 12 - 19, pp. 4504 - 4508. 2021.

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00802>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 4** Jose M. Mercero; Elixabete Rezabal; Jesus M Ugalde; Thomas Weiske; Jilai Li. Experiment and Theory Clarify: Sc⁺ Receives One Oxygen Atom from SO₂ to Form ScO⁺, which Proves to be a Catalyst for the Hidden Oxygen-Exchange with SO₂. Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry. 2021.

DOI: 10.1002/cphc.2021007**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 5** Radhika Gupta; Elixabete Rezabal; Golshid Hasrack; Gilles Frison. Comparison of Chemical and Interpretative Methods: the Carbon-Boron π -Bond as a Test Case. Chemistry-a European Journal. 10.1002/chem.2020019, 2020.

DOI: 10.1002/chem.202001945**Tipo de producción:** Artículo científico

- 6** Juan Gurruchaga-Pereda; Virginia Martínez-Martínez; Elixabete Rezabal; Xabier Lopez; Claudio Garino; Fabrizio Mancin; Aitziber L. Cortajarena; Luca Salassa. Flavin Bioorthogonal Photocatalysis Toward Platinum Substrates. ACS Catalysis. 10, pp. 187 - 196. 2020.

DOI: <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b02863>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

- 7** Jon Zubeltzu; Elena Formoso; Elixabete Rezabal. Lignin solvation by ionic liquids: the role of cation. Journal of Molecular Liquids. 303, pp. 112588. 2020.

DOI: 10.1016/j.molliq.2020.112588**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 6.165**Revista dentro del 25%:** Si

- 8** Florian D'Accriscio; Alexia Ohleier; Emmanuel Nicolas; Matthieu Demange; Olivier Thillaye Du Boullay; Nathalie Saffon-Merceron; Marie Fustier-Boutignon; Elixabete Rezabal; Gilles Frison; Noel Nebra; Nicolas Mézailles. [(dcp)Ni(η^2 -Arene)] Precursors: Synthesis, Reactivity, and Catalytic Application to the Suzuki-Miyaura Reaction. Organometallics. 39 - 10, pp. 1688. 2020.

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.9b00834>**Tipo de producción:** Artículo científico

- 9** Julien Pastor; Elixabete Rezabal; Arnaud Voituriez; Jean-Francois Betzer; Angela Marinetti; Gilles Frison. Revised theoretical model on enantiocontrol in phosphoric acid catalyzed H-transfer hydrogenation of quinoline. Journal of organic chemistry. 10.1021/acs.joc.7b03, ACS, 2018.

DOI: 10.1021/acs.joc.7b03248**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** Organic Chemistry



Índice de impacto: 4.745
Posición de publicación: 7

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 57

- 10** Silvia Alonso-de Castro; Emmanuel Ruggiero; Ane Ruiz-de-Angulo; Elixabete Rezabal; Juan C. Mareque-Rivas; Xabier Lopez; Fernando López-Gallego; Luca Salassa. Riboflavin As Bioorthogonal Photocatalyst For The Activation Of A PtIV Prodrug. *Chemical Science*. 8, pp. 4619 - 4625. Royal Society of Chemistry, 2017.

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7SC01109A>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Química multidisciplinar

Índice de impacto: 9.063

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 18

Num. revistas en cat.: 171

- 11** Elixabete Rezabal; Jesus Ugalde; Gernot Frenking. The trans Effect in Palladium Phosphine Sulphonate Complexes. *The Journal of Physical Chemistry A*. 121, pp. 7709 - 7716. American Chemical Society, 2017.

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b06856>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)

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

Índice de impacto: 2836

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 14

Num. revistas en cat.: 37

- 12** Andreas A Danopoulos; Pierre Braunstein; Kirill Yu Monakhov; Jan van Leusen; Martin Clémancey; Paul Kögerler; Jean-Marc Latour; Anass Benayad; Moniek Tromp; Elixabete Rezabal; Gilles Frison. Heteroleptic, Two-coordinate [M(NHC){N(SiMe₃)₂}] (M = Co, Fe) Complexes: Synthesis, Reactivity and Magnetism Rationalized by an Unexpected Metal Oxidation State. *Dalton Transactions*. 46, pp. 1163 - 1171. Royal Society of Chemistry, 21/12/2016.

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT03565E>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Química Inorgánica y Nuclear

Índice de impacto: 4.099

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 45

- 13** Elixabete Rezabal; Gilles Frison. Estimating ? binding energy of N-Heterocyclic carbenes: The role of polarization. *Journal of Computational Chemistry*. 36 - 8, pp. 564 - 572. 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/jcc.23852>>. ISSN 1096-987X

DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.23852>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Química multidisciplinar

Índice de impacto: 3.648

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 41

Num. revistas en cat.: 163

- 14** Elixabete Rezabal; José M. Asua; Jesus M. Ugalde. Homopolymerization of Ethylene by Palladium Phosphine Sulfonate Catalysts: The Role of Structural and Environmental Factors. *Organometallics*. 34 - 1, pp. 373 - 380. 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/om5011947>>.

DOI: <https://doi.org/10.1021/om5011947>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: Química Inorgánica y Nuclear

Índice de impacto: 4.186

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 9

Num. revistas en cat.: 46



- 15** Elixabete Rezabal; Thomas Schafer. Ionic liquids as solvents of polar and non-polar solutes: affinity and coordination. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, pp. 14588 - 14597. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP01774B>>.
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CP01774B>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.449
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Química Física
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 144
- 16** Andreas A. Danopoulos; Pierre Braunstein; Elixabete Rezabal; Gilles Frison. Unprecedented directed lateral lithiations of tertiary carbons on NHC platforms. *Chem. Commun.* 51, pp. 3049 - 3052. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C4CC08434A>>.
DOI: DOI <https://doi.org/10.1039/C4CC08434A>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 6.567
Posición de publicación: 21
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
- 17** Jon I Mujika; Elixabete Rezabal; Jose M Mercero; Fernando Ruipérez; Dominique Costa; Jesus M Ugalde; Xabier Lopez. Aluminium in Biological Environments: A Computational Approach. *Computational and structural biotechnology journal.* 9, Research Network of Computational and Structural Biotechnology, 2014.
DOI: <https://doi.org/10.5936/csbj.201403002>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.148
Posición de publicación: 68
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 293
- 18** Isabel Machado; Veli Cengiz Özalp; Elixabete Rezabal; Thomas Schäfer. DNA Aptamers are Functional Molecular Recognition Sensors in Protic Ionic Liquids. *Chemistry-A European Journal.* 20 - 37, pp. 11820 - 11825. WILEY-VCH Verlag, 2014.
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201403354>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.731
Posición de publicación: 22
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157
- 19** Noelia B Luque; Jon I Mujika; Elixabete Rezabal; Jesus M Ugalde; Xabier Lopez. Mapping the affinity of aluminum (III) for biophosphates: interaction mode and binding affinity in 1: 1 complexes. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 16 - 37, pp. 20107 - 20119. Royal Society of Chemistry, 2014.
DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CP02770A>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.493
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 139



- 20** Elixabete Rezabal; Thomas Schäfer. First principle approach to solvation by methylimidazolium-based ionic liquids. *The Journal of Physical Chemistry B.* 117 - 2, pp. 553 - 562. American Chemical Society, 2013.
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp305379s>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.377
Posición de publicación: 39
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 136
- 21** E Rezabal; F Ruipérez; JM Ugalde. Quantum chemical study of the catalytic activation of methane by copper oxide and copper hydroxide cations. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 15 - 4, pp. 1148 - 1153. Royal Society of Chemistry, 2013.
DOI: <https://doi.org/10.1039/C2CP43544F>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.198
Posición de publicación: 33
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 136
- 22** Jon Iñaki Mujika; Xabier López; Elixabete Rezabal; R Castillo; S Marti; V Moliner; Jesus M Ugalde. A QM/MM study of the complexes formed by aluminum and iron with serum transferrin at neutral and acidic pH. *Journal of inorganic biochemistry.* 105 - 11, pp. 1446 - 1456. Elsevier, 2011.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2011.07.019>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.354
Posición de publicación: 10
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 23** Elixabete Rezabal; Jürgen Gauss; Jon M Matxain; Robert Berger; Martin Diefenbach; Max C Holthausen. Quantum chemical assessment of the binding energy of CuO⁺. *The Journal of chemical physics.* 134 - 6, pp. 064304 - 064313. AIP Publishing, 2011.
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3537797>
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.33
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
- 24** J Larrucea; E Rezabal; T Marino; N Russo; JM Ugalde. Ab initio study of microsolvated Al³⁺- aromatic amino acid complexes. *The Journal of Physical Chemistry B.* 114 - 27, pp. 9017 - 9022. ACS Publications, 2010.
DOI: [10.1021/jp101874p](https://doi.org/10.1021/jp101874p)
Tipo de producción: Artículo científico
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.603
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 127
- 25** Elixabete Rezabal; Lucie Duchackova; Petr Milko; Max C Holthausen; Jana Roithová. Ligand Effects on the [Cu(PhO)(PhOH)]⁺ Redox Active Complex. *Inorganic chemistry.* 49 - 18, pp. 8421 - 8429. American Chemical Society, 2010.
DOI: <https://doi.org/10.1021/ic100952q>

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.326

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 43

- 26** 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. The Journal of chemical physics. 128 - 19, pp. 194315 - 194315. AIP Publishing, 2008.

DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2920480>

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.149

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

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

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 27** Elixabete Rezabal; Jose M Mercero; Xabier Lopez; Jesus M Ugalde. A theoretical study of the principles regulating the specificity for Al (III) against Mg (II) in protein cavities. Journal of inorganic biochemistry. 101 - 9, pp. 1192 - 1200. Elsevier, 2007.

DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2007.06.010

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.77

Posición de publicación: 11

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 28** E Rezabal; T Marino; JM Mercero; N Russo; JM Ugalde. Assessment of Approximate Density Functional Methods for the Study of the Interactions of Al (III) with Aromatic Amino Acids. Journal of Chemical Theory and Computation. 3 - 5, pp. 1830 - 1836. ACS Publications, 2007.

DOI: 10.1021/ct700027n

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.308

Posición de publicación: 16

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 128

- 29** E Rezabal; T Marino; JM Mercero; N Russo; JM Ugalde. Complexation of Al(III) by aromatic amino acids in the gas phase. Inorganic chemistry. 46 - 16, pp. 6413 - 6419. American Chemical Society, 2007.

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic7004776>

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 43

- 30** Elixabete Rezabal; Jose M Mercero; Xabier Lopez; Jesus M Ugalde. Protein side chains facilitate Mg/Al exchange in model protein binding sites. ChemPhysChem. 8 - 14, pp. 2119 - 2124. WILEY-VCH Verlag, 2007.

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700335>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.502
Posición de publicación: 23

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 111

- 31** Elixabete Rezabal; Jose M Mercero; Xabier Lopez; Jesus M Ugalde. A study of the coordination shell of aluminum (III) and magnesium (II) in model protein environments: thermodynamics of the complex formation and metal exchange reactions. Journal of inorganic biochemistry. 100 - 3, pp. 374 - 384. Elsevier, 2006.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2005.12.007>

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.654

Posición de publicación: 13

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 44

- 32** Christine M Davidson; Mark D Gibson; Elaine Hamilton; Brian H MacGillivray; John Reglinski; Elixabete Rezabal. The long-term environmental behaviour of strontium and barium released from former mine workings in the granites of the Sunart region of Scotland, UK. Chemosphere. 58 - 6, pp. 793 - 798. Elsevier, 2005.

DOI: 10.1016/j.chemosphere.2004.08.101

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.297

Posición de publicación: 21

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - ENVIRONMENTAL SCIENCES

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 140

- 33** Jose M Mercero; Jon M Matxain; Elixabete Rezabal; Xabier Lopez; Jesus M 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 Online Library, 2004.

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.20075>

Tipo de producción: Artículo científico

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.392

Posición de publicación: 17

Tipo de soporte: Revista

Categoría: Science Edition - MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 52

- 34** Elixabete Rezabal Astigarraga. Binding and specificity of Aluminum in proteins. Universidad del País Vasco, Servicio Editorial, 2008.

Tipo de producción: Libro o monografía científica

Tipo de soporte: Libro

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Development Of New Gold Photoactivatable Anticancer Prodrugs
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry and Computational Modeling: 20 years promoting Excellence in Science
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Donostia, España
Fecha de celebración: 30/05/2019
Fecha de finalización: 01/07/2019

Tipo de entidad: DIPC



Entidad organizadora: Donostia International
Physics Center
Elixabete Rezabal.

- 2** **Título del trabajo:** Development Of New Gold Photoactivatable Anticancer Prodrugs
Nombre del congreso: XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Donostia-San Sebastián, España
Fecha de celebración: 26/05/2019
Fecha de finalización: 30/05/2019
Entidad organizadora: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Elixabete Rezabal.
- 3** **Título del trabajo:** Ionic liquids for biomass treatment: a computational approach
Nombre del congreso: EMN Ionic Liquids
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 06/08/2018
Fecha de finalización: 10/08/2018
- 4** **Título del trabajo:** Biomass treatment by ionic liquids
Nombre del congreso: ESPA 2018
Tipo de participación: Participativo - Póster
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
Madrid
- 5** **Título del trabajo:** PALLADIUM PHOSPHINE SULFONATE CATALYSTS FOR THE HOMOPOLYMERIZATION OF ETHYLENE
Nombre del congreso: ESPA
Autor de correspondencia: Si
Ciudad de celebración: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Fecha de celebración: 28/06/2016
Fecha de finalización: 01/07/2016
Entidad organizadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad organizadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Elixabete Rezabal; Jesus Ugalde.
- 6** **Título del trabajo:** Analyse des interactions donneur-accepteur entre carbènes et acides de Lewis: un nouvel éclairage
Nombre del congreso: RCTF 2014
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Paris, Francia
Fecha de celebración: 07/2014
Elixabete Rezabal Astigarraga; Gilles Frison.



- 7** **Título del trabajo:** Proprièts pi des carbènes N-hètèrocycliques: une ètude thèorique
Nombre del congreso: GECOM 2014
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Vers, Francia
Fecha de celebración: 06/2014
Elixabete Rezabal Astigarraga; Gilles Frison.
- 8** **Título del trabajo:** Selective extraction of CO₂ by ionic liquid containing polymeric membranes
Nombre del congreso: CAPZEO 2013
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Paris, Francia
Fecha de celebración: 09/2013
Elixabete Rezabal Astigarraga; Ana Corres; Thomas Schäfer.
- 9** **Título del trabajo:** A first principle approach to solvation by imidazolium based ionic liquids
Nombre del congreso: Topological approaches to weak interactions
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Paris, Île de France, Francia
Fecha de celebración: 06/2013
Entidad organizadora: Université Pierre et Marie Curie
Elixabete Rezabal Astigarraga; Julia Contreras García; Thomas Schäfer.
- 10** **Título del trabajo:** Solvation of small organic molecules by [MMIM][Cl]: a theoretical study
Nombre del congreso: EUCHEM 2012
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Celtic Manor, Reino Unido
Fecha de celebración: 08/2012
Elixabete Rezabal Astigarraga; Ana Corres; Thomas Schäfer.
- 11** **Título del trabajo:** Molecular Recognition of ATP-Aptamers used for nanodevices
Nombre del congreso: Gordon Research Conference Biopolymers
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Newport, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 06/2012
Elixabete Rezabal Astigarraga; Isabel Machado; Thomas Schäfer.
- 12** **Título del trabajo:** Methane activation by Cu⁺ species
Nombre del congreso: QUITEL 2011
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Cancun, México
Fecha de celebración: 12/2011
Elixabete Rezabal Astigarraga; Fernando Ruipérez; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.



- 13 Título del trabajo:** Solute-specific ionic liquids. A first principle approach (Best Poster Award)
Nombre del congreso: WATOC 2011
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 06/2011
Elixabete Rezabal Astigarraga; M. Belen Serrano Santos; Ana Corres Ortega; Thomas Schäfer.
- 14 Título del trabajo:** Ligand effects on the [Cu(PhO)(PhOH)]⁺ redox active complex
Nombre del congreso: 46th Symposium on Theoretical Chemistry
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Münster, Alemania
Fecha de celebración: 10/2010
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jana Roithova; Max Holthausen.
- 15 Título del trabajo:** Ligand effects on the [Cu(PhO)(PhOH)]⁺ redox active complex
Nombre del congreso: Electronic structure: principles and applications 2010
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 06/2010
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jana Roithova; Max C. Holthausen.
- 16 Título del trabajo:** Fundamentals of bioinorganically relevant Cu(I) complexes
Nombre del congreso: Theoretical biophysics symposium 2009
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Roscoff, Francia
Fecha de celebración: 06/2009
Elixabete Rezabal Astigarraga; Max C. Holthausen.
- 17 Nombre del congreso:** Electronic structure: principles and applications 2008
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 09/2008
Elixabete Rezabal Astigarraga.
- 18 Título del trabajo:** Protein side chains that facilitate Mg/Al metal exchange in model protein binding sites
Nombre del congreso: Theoretical biophysics symposium 2007
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Cetraro, Italia
Fecha de celebración: 06/2007
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M. Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 19 Título del trabajo:** Protein side chains that facilitate Mg/Al metal exchange in model protein binding sites
Nombre del congreso: Seventh Keele meeting on Aluminium'
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Yucatan, México

Fecha de celebración: 02/2007

Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.

- 20 Título del trabajo:** Protein side chains that facilitate Mg/Al metal exchange in model protein binding sites
Nombre del congreso: Donostia Quantum Chemistry Symposium
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Donostia-San Sebastián, País Vasco, España
Fecha de celebración: 12/2006
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M. Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 21 Título del trabajo:** Interaction of Al(III) with aromatic amino acids: pi and non pi binding sites
Nombre del congreso: Electronic structure: principles and applications 2006
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 07/2006
Elixabete Rezabal Astigarraga; Tiziana Marino; J. M. Mercero; Nino Russo; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 22 Título del trabajo:** Interaction of Al(III) with aromatic amino acids: pi and non pi binding sites
Nombre del congreso: Biological molecules in gas phase Gordon Research Conference
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Maine, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 07/2005
Elixabete Rezabal Astigarraga; Tiziana Marino; J. M. Mercero; Nino Russo; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 23 Título del trabajo:** Different ligand combination of the first solvation shell of Aluminium (III) and Magnesium (II) cations in a protein model environment
Nombre del congreso: Theoretical biophysics symposium 2005
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Orebro, Suecia
Fecha de celebración: 06/2005
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M. Mercero; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 24 Título del trabajo:** Aluminum interactions in a protein model environment
Nombre del congreso: Sixth Keele meeting on Aluminium
Ciudad de celebración: Bussaco, Portugal
Fecha de celebración: 02/2005
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M. Mercero; Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria.
- 25 Título del trabajo:** Aluminum interactions in a protein model environment
Nombre del congreso: Electronic structure: principles and applications 2004
Tipo evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 07/2004
Elixabete Rezabal Astigarraga; Jose M. Mercero.

Otros méritos

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

- Entidad de realización:** University of Geneva **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Geneva, Suiza
Fecha de inicio-fin: 06/2007 - 07/2007 **Duración:** 1 mes
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
Tareas contrastables: Aprendizaje de métodos multiconfiguracionales
- Entidad de realización:** Università della Calabria **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Dipartimento di chimica
Ciudad entidad realización: Rende, Italia
Fecha de inicio-fin: 06/2005 - 12/2005 **Duración:** 6 meses
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
Tareas contrastables: Investigación de microhidratación de metales, escritura de artículos científicos.

Accreditaciones/reconocimientos obtenidos

- Descripción:** Acreditación Profesora titular
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación **Tipo de entidad:** -
Fecha del reconocimiento: 13/05/2020
- Descripción:** Acreditación profesor contratado doctor
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación **Tipo de entidad:** Agencia de acreditación
Fecha del reconocimiento: 06/10/2016
- Descripción:** Acreditación profesor de universidad privada
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación **Tipo de entidad:** Agencia de acreditación
Fecha del reconocimiento: 06/10/2016
- Descripción:** Acreditación personal doctor investigador
Entidad acreditante: UNIBASQ **Tipo de entidad:** Organismo de acreditación
Ciudad entidad acreditante: Vitoria-Gasteiz, País Vasco, España
Fecha del reconocimiento: 04/04/2014
- Descripción:** Acreditación profesor adjunto
Entidad acreditante: UNIBASQ **Tipo de entidad:** Organismo de acreditación
Ciudad entidad acreditante: Vitoria-Gasteiz, País Vasco, España
Fecha del reconocimiento: 04/04/2014