



## **Jon Mattin Matxain Beraza**

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 26/08/2019

**v 1.4.0**

41089fe5a97270e531e8c12061de74e8

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

41089fe5a97270e531e8c12061de74e8

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:** 7

**Supervised Final Year Works:** 13

**Indexed Publications:** 92

**Journals:** 89

**Books and Book Chapters:** 3

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

**Q1 Publications:** 65 (74%)

**H index:** 26 (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. ezkerria  
**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:** 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
- 2 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
- 3 Título del trabajo:** Oxigeno espezie erreaktiboen 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
- 4 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
- 5 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
- 6 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



- 7** **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
- 8** **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
- 9** **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
- 10** **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
- 11** **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
- 12** **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



- 13** **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
- 14** **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
- 15** **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
- 16** **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
- 17** **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
- 18** **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

**19 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

**20 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

**21 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

**22 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:** 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 €
- 2** **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 €
- 3** **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

**Cuantía total:** 34.586,39 €

**Duración:** 3 años

**4 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

**Cuantía total:** 3.000.000 €

**Duración:** 4 años

**Cuantía subproyecto:** 249.876 €

**5 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

**Cuantía total:** 401.598 €

**Duración:** 6 años

**6 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

**Cuantía total:** 28.000 €

**Duración:** 3 años



- 7** **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 €
- 8** **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 €
- 9** **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 €



- 10** **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 €
- 11** **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 €
- 12** **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 €





- 13** **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 €
- 14** **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 €
- 15** **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 €



- 16** **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 €
- 17** **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 €
- 18** **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 €





- 19** **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 **Tipo de entidad:** Gobierno Vasco  
**Ciudad entidad financiadora:** País Vasco, España  
**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 €
- 20** **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 €
- 21** **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 €



- 22** **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 **Duración:** 4 años  
**Cuantía total:** 181.999,99 €
- 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,...):** 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 €
- 24** **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 €



- 25 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 €
- 26 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
- 27 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 €
- 28 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 €

**29** **Nombre del proyecto:** Avances en Química Cuántica  
**Modalidad de proyecto:** De investigación **Ámbito geográfico:** Nacional  
fundamental (incluyendo excavaciones  
arqueológicas, etc.).  
**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

**30** **Nombre del proyecto:** Avances en Química Cuántica  
**Modalidad de proyecto:** De investigación **Ámbito geográfico:** Nacional  
fundamental (incluyendo excavaciones  
arqueológicas, etc.).  
**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

**31** **Nombre del proyecto:** Investigación de nuevos materiales para el desarrollo de células solares de gran  
eficiencia  
**Modalidad de proyecto:** De investigación **Ámbito geográfico:** Autonómica  
fundamental (incluyendo excavaciones  
arqueológicas, etc.).  
**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



- 32** **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
- 33** **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
- 34** **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:** 26

**Fecha de aplicación:** 23/08/2019

### Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** 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. 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:**

**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
- 2** 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(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub>. Macromolecules. ACS, 19/08/2019. Disponible en Internet en: <<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.9b01050>>.

**DOI:** 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

**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
- 3** 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

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 6

**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



- 4** 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
- 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
- 5** 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:** 0
- 6** 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  
**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:** 3
- 7** 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:** 6

- 8** 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:** 7

- 9** 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

- 10** 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

**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



**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 2**Publicación relevante:** Si

- 11** 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:** 7

- 12** Elena Formoso; Jon M. Matxain; Jose M. Asua; Fernando Ruiperez. 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:** 6

- 13** 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**Nº total de autores:** 5**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:** No**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 2

- 14** 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

**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:** 23

- 15** 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

- 16** 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)

**Índice de impacto:** 5.256

**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 - MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 31

- 17** David Casanova; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. Plasmonic Resonances in the Al<sub>13</sub> 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

**Tipo de soporte:** Revista



**Nº total de autores:** 3

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 4.536

**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 - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 10

- 18** Rafael Grande Aztatzi; Elena Formoso; Jose M. Mercero; Jon M. Matxain; Slawomir J. Grabowski; Jesus M. Ugalde. Structural and optical properties of the naked and passivated Al<sub>5</sub>Au<sub>5</sub> 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:** 2

- 19** 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

**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:** 34

- 20** 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

**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:** 35



**Publicación relevante:** Si

- 21** 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
- 22** 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
- 23** 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
- 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:** 24
- 24** 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



**Publicación relevante:** Si

- 25** 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:** 83
- 26** 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
- 27** 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)  
**Índice de impacto:** 2.920  
**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:** 49
- 28** 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)
- Tipo de soporte:** Revista  
**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo





**Índice de impacto:** 2.921

**Fuente de citas:** WOS

**Publicación relevante:** Si

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

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 51

- 29** X. Lopez; M. Piris; J. M. Matxain; J. M. Ugalde. {Performance of PNOF3 for reactivity studies: X<sub>2</sub>BO and X<sub>2</sub>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#ldivAbstract>>. 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

- 30** 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:** 37

- 31** 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

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.093

**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:** 39

- 32** Jose M. Mercero; Mario Piris; Jon M. Matxain; Xabier Lopez; Jesus M. Ugalde. Sandwich Complexes of the Metalloaromatic eta(3)-Al<sub>3</sub>R<sub>3</sub> 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

- 33** 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

- 34** 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:** 36

- 35** 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

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5.115

**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, MEDICINAL

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 47

- 36** 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

**Tipo de soporte:** Revista



**Posición de firma:** 1

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5.015

**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, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 36

- 37** 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

- 38** 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:** 91

- 39** 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

- 40** 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

- 41** 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:** 77

- 42** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of group-(II-VI) materials: Zn<sub>i</sub>X<sub>i</sub>, 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:** 60

- 43** 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:** 60

- 44** JM Matxain; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of II-VI materials: ZnO<sub>i</sub>, 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:** 82
- 45** JM Matxain; JE Fowler; JM Ugalde. Small clusters of II-VI materials: ZnSi<sub>i</sub>, 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
- 46** 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:** 10
- 47** 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

- 48** 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
- 49** 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
- 50** 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
- 51** 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  
**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
- 52** Oier Lakuntza; Jon M. Matxain; Fernando Ruiperez; Jesus M. Ugalde; Peter B. Armentrout. Quantum Chemical Study of the Reactions between Pd<sup>+</sup>/Pt<sup>+</sup> and H<sub>2</sub>O/H<sub>2</sub>S. *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)  
**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

**Índice de impacto:** 5.696**Fuente de citas:** WOS**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 2

- 53** 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**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**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.867**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 1

- 54** 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**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**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.867**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 7

- 55** 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**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**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.143**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 20

- 56** 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**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**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.829**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 7

- 57** 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
- 58** 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:** 25
- 59** 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
- 60** 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



- 61** 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:** 17
- 62** 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
- 63** 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
- 64** 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  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.333  
**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:** 21
- 65** 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  
**Tipo de soporte:** Revista





**Posición de firma:** 1

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.280

**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, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Citas:** 11

- 66** Oier Lakuntza; Jon M. Matxain; Jesus M. Ugalde. Quantum Chemical Study of the Reaction between Ni<sup>+</sup> and H<sub>2</sub>S. 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

- 67** 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:** 14

- 68** 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)

**Índice de impacto:** 2.920

**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:** 6

- 69** Elisa Jimenez-Izal; Jon M. Matxain; Mario Piris; Jesus M. Ugalde. Structure and Stability of the Endohedrally Doped (X@C<sub>d</sub>iSi)<sub>(i=4,9,12,15,16)</sub>(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)

**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

**Índice de impacto:** 4.524**Fuente de citas:** WOS**Revista dentro del 25%:** Si**Citas:** 8

- 70** 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

- 71** 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:** 13

- 72** 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:** 6

- 73** 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



- 74** 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 Mn<sup>2+</sup>. 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
- 75** 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:** 13
- 76** 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:** 49
- 77** 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  
**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:** 42
- 78** 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  
**Tipo de soporte:** Revista

**Posición de firma:** 2

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 4.115

**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, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** Si

**Citas:** 28

- 79** 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:** 31

- 80** 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

- 81** JM Matxain; JM Mercero; A Irigoras; JM Ugalde. Discordant results on the FeO<sup>++</sup>H<sup>-2</sup> 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

**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:** 16

- 82** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Clusters of II-VI materials: CdiXi, X = S, Se, Te, i <= 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:** 46



- 83** 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
- 84** 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
- 85** JM Matxain; JM Mercero; JE Fowler; JM Ugalde. Clusters of group II-VI materials: CdiOi ( $i \leq 15$ ). 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:** 18
- 86** 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  
**Posición de firma:** 3
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.438
- 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:** 6
- 87** 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  
**Tipo de soporte:** Revista



**Posición de firma:** 2

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1.514

**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, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Citas:** 16

- 88** 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

- 89** 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

- 90** 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

- 91** The one-electron picture in the Piris 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

- 92** 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

**Publicación relevante:** Si

**Tipo de soporte:** Libro

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de libro completo





- 93** 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](https://www.mdpi.com/journal/polymers/special_issues/Dynamic)>.  
**Tipo de producción:** Edición científica **Tipo de soporte:** Revista  
**Posición de firma:** 2 **Grado de contribución:** Editor/a o coeditor/a  
**Nº total de autores:** 2

### Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **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
- 2** **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
- 3** **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.
- 4** **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



- 5** **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.
- 6** **Título del trabajo:** Transition Metal Doped Magnetic Zn<sub>12</sub>S<sub>12</sub> 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.
- 7** **Título del trabajo:** Magnetic endohedral TM@Zn<sub>12</sub>S<sub>12</sub> 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 **Tipo de entidad:** Centro de Investigación Physics Center  
Jon M. Matxain.
- 8** **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 **Tipo de entidad:** Universidad  
Jon M. Matxain.
- 9** **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 **Tipo de entidad:** Entidad Empresarial



Jon M. Matxain.

- 10** **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.
- 11** **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 **Tipo de entidad:** Centro de Investigación  
Physics Center  
Jon M. Matxain.
- 12** **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.
- 13** **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.
- 14** **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  
**Tipo de entidad:** Centro de Investigación



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

- 15 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 Químicos Teóricos y Computacionales (WATOC)  
Jon M. Matxain. **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones
- 16 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.
- 17 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.
- 18 Título del trabajo:** Nature of chemical bonds by means of PNOF theory  
**Nombre del congreso:** Congreso de Químicos 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.
- 19 Título del trabajo:** Study of the attack of the OH and NO radicals to the protein backbone  
**Nombre del congreso:** Electronic Structure: Principles 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

Jon M. Matxain.

**Tipo de entidad:** Universidad

- 20** **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.
- 21** **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.
- 22** **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:** Gmünd, 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.
- 23** **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.





- 24** **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.
- 25** **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.
- 26** **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.
- 27** **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.
- 28** **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 Baleares **Tipo de entidad:** Universidad  
Jon M. Matxain.
- 29** **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  
Jon M. Matxain.

**Tipo de entidad:** Universidad

**30 Título del trabajo:** Mn@Sn<sub>12</sub> 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  
Physics Center  
Jon M. Matxain.

**Tipo de entidad:** Centro de Investigación

**31 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  
Jon M. Matxain.

**Tipo de entidad:** Universidad

**32 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

**33 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

**34 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.

- 35** **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 **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** örebro, Suecia  
Jon M. Matxain.
- 36** **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 **Tipo de entidad:** Universidad  
Jon M. Matxain.
- 37** **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.
- 38** **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.
- 39** **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.



- 40** **Título del trabajo:** Small clusters of II-VI materials: Zn<sub>i</sub>S<sub>i</sub>, 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.
- 41** **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.
- 42** **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.
- 43** **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.
- 44** **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 Martín 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 **Tipo de entidad:** Agencia estatal  
**Fecha del reconocimiento:** 18/01/2013

**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 **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Fecha del reconocimiento:** 13/04/2004