

**CURRICULUM VITAE ABREVIADO (últimos 6 años)**
IMPRESO NORMALIZADO**Fecha: 2025-2-1****A. DATOS PERSONALES**

Nombre y apellidos	Sonia Arrasate Gil		
DNI/NIE/pasaporte	20181707N	Edad	51
Nº identificación del investigador	Researcher ID	F-9296-2016	
	Código Orcid	0000-0003-2601-5959	

A.1. Situación profesional actual

Entidad	UPV/EHU		
Facultad/Escuela/Instituto	Facultad de Ciencia y Tecnología		
Dpto./Centro	Dpto. Química Orgánica e Inorgánica		
Dirección	Barrio Sarriena s/n 48940 Leioa, Bizkaia		
Teléfono	946012730	Correo electrónico	sonia.arrasate@ehu.eus
Categoría profesional	Profesora Agregada		Fecha inicio
Situación administrativa	Plantilla	Contratado	Interino
	Becario	Otra situación	
Dedicación	Completa	Parcial	
Especialización (cód. UNESCO)	230610, 230691, 230616		
Palabras clave	Síntesis estereoselectiva, heterociclos nitrogenados, organocatálisis, Química Médica, Químioinformática		

A.2. Formación académica

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciado en Ciencias, Sección Químicas	UPV/EHU	1996
Licenciado con Grado	UPV/EHU	1998
Doctorado en Ciencias Químicas	UPV/EHU	2003

A.3. Cargos y actividades de carácter científico o profesional desempeñadas con anterioridad

Puesto	Entidad	Fechas
Socio Fundador	IKERDATA S.L.	07/2021
Asesora Científica	IKERDATA S.L.	07/2021-actualidad

A.4. Indicadores generales de calidad de la producción científica*Indique el valor para el conjunto de su trayectoria científica*

Número de sexenios de investigación	3
Fecha último sexenio concedido	2019
Nº de tesis doctorales dirigidas	3
Índice H (indicar fuente si no es Web of Science)	20
Publicaciones en primer cuartil (Q1) (Web of Science)	>30
Nº total de publicaciones	52
Nº total de publicaciones indexadas	52
Nº de citas totales	963
Promedio de citas por año	18.9
Otros indicadores (especificar)	

B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM (máximo 3500 caracteres, incluyendo espacios en blanco)

Describe brevemente su trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de su línea de investigación. Indique también otros aspectos o peculiaridades que considere de importancia para comprender su trayectoria.

Licenciada en Ciencias Químicas en la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea. Realicé la Tesis Doctoral bajo la supervisión de las profesoras Esther Lete y Nuria Sotomayor en dicha universidad. Desde 1997 vinculada a la UPV/EHU en donde soy profesora desde 2002. En este periodo he participado en numerosos proyectos de investigación estrechamente relacionados con las siguientes líneas de investigación:

1. Secuencia metalación-ciclación en síntesis estereocontrolada de heterociclos nitrogenados.
2. Reacciones de α -amidoalquilación enantioselectivas.
3. Aplicaciones de las reacciones catalizadas por metales de transición en la síntesis de indolicidinas fusionadas, quinolinas y homólogos.
4. Nuevos modelos computacionales para la predicción de reactividad química, actividad biológica y toxicidad.

Los resultados científicos obtenidos están recogidos en revistas especializadas de reconocido prestigio en el área de Química Orgánica y parte de las aportaciones están recogidas en artículos de revisión, publicados en revistas prestigiosas en el área como, Natural Product Reports o Advances in Heterocyclic Chemistry.

Además, cabe mencionar la participación en los siguientes proyectos: 1. Contaminación orgánica y organometálica en la Reserva de Urdaibai: identificación de posibles focos contaminantes, desarrollo de herramientas analíticas para su cuantificación y monitorización en sedimentos y moluscos del estuario. 2. Caracterización de contaminantes orgánicos emergentes, según la directiva marco europea de aguas, en el estuario de Urdaibai. Síntesis, caracterización y estrogenicidad de isómeros del nonilfenol. 3. Compuestos disruptores endocrinos (EDCs) en plantas de tratamiento de aguas residuales de Bizkaia.

Estos proyectos se enmarcan dentro de una línea de investigación paralela multidisciplinar en la que participamos los departamentos de Química Orgánica, Química Analítica, Ingeniería Química y Zoología y Biología Celular Animal de la UPV/EHU y en donde mi labor está estrechamente relacionada con la Química Orgánica, bien sea mediante la Caracterización de hidrocarburos Policíclicos Aromáticos (PAHs), Bifenilos Policlorados

(PCBs) y compuestos organometálicos, o bien mediante la síntesis y caracterización de isómeros del nonilfenol.

Paralelamente a estas labores de investigación cabe resaltar la pertenencia a la Cátedra UNESCO sobre Desarrollo Sostenible y Educación Ambiental de la UPV/EHU como miembro del comité de expertos. El objetivo fundamental de la Cátedra UNESCO consiste en establecer una unidad que impulse la investigación aplicada, la enseñanza y los estudios especializados sobre temas de Desarrollo Sostenible y Educación Ambiental desde una óptica interdisciplinar que englobe tanto las ciencias naturales como las sociales y las técnicas, en donde personalmente llevo a cabo mis labores desde el punto de vista de un Químico Orgánico.

En los últimos diez años, he centrado la investigación en el campo de la quimioinformática, diseñando modelos informáticos predictivos enfocados a una mejora de los resultados en síntesis y a la búsqueda de compuestos con actividades farmacológicas. En este sentido cabe mencionar también la participación como investigadora en varios proyectos Elkartek recientes, AIMOFGIFT, CHAIN, CardiCaM y PHAIKER, que contribuyen a la transferencia del conocimiento con captación de recursos económicos. Mediante el proyecto AIMOFGIFT ha sido hemos conseguido desarrollar un nuevo sistema de liberación de fármacos para mejorar las funciones del tracto gastrointestinal y los tratamientos de enfermedades relacionadas. Dentro del proyecto CHAIN hemos elaborado junto con PETRONOR REPSOL, modelos predictivos para la mejora de mezclas de la gasolina y del queroseno y parte de los resultados se acaban de publicar en la Revista Fuel (IF 6.609). Dentro del proyecto CardiCaM, hemos podido acceder a modelos PTML predictivos para el desarrollo de fármacos que interactúan con complejos de calmodulina. Además, el proyecto PHAIKER nos ha permitido predecir la actividad de compuestos en la modulación de la activación de receptores acoplados a la proteína G en el cerebro humano.

C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES

Indique los méritos correspondientes únicamente a los últimos 6 años en todos los apartados desde C1 hasta C10. Es imprescindible indicar la fecha concreta a cada mérito. En los casos en que se hubiera producido alguna interrupción en la labor investigadora motivada por alguna de las situaciones previstas en el segundo párrafo del punto 14 del artículo 27 de la Orden de convocatoria se podrá incrementar el periodo de actividad investigadora a tener en cuenta según lo establecido en dicho párrafo.

C.1. Publicaciones indexadas

Autores: He, S.; Barón, A.; Munteanu, C.; De Bilbao, B.; Casanola-Martin, G.; Chelu, M.; Musuc, A.M.; Bediaga, H.; Ascencio, E.; Castellanos-Rubio, I.; Arrasate, S.; Pazos, A.; Insausti, M.; Rasulev, B.; González-Díaz, H.

Título: Drug Release Nanoparticle Systems Design: Dataset Compilation and Machine Learning Modeling

Nombre revista: ACS Applied Materials & Interfaces

Volumen: 17

Pág. inicial: 5290

Pág. final:

Año: **2025**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: IF Base de datos
8.5

Cuartil: Q1

Autores: H. Bediaga-Bañeres, I. Moreno-Benítez, S. Arrasate, L. Pérez-Álvarez, A.K. Halder, N.D. S. Cordeiro, H. González-Díaz, J.L. Vilas-Vilela

Título: AI Driven Modelling for Hydrogel 3D-Printing: Computational and Experimental Cases of Study

Nombre revista: Polymers

Volumen: 17

Pág. inicial: 121

Pág. final:

Año: **2025**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1

Autores: Maider Baltasar-Marchueta, Leire Llona, Sara M-Alicante, Iratxe Barbolla, Markel Garcia Ibarluzea, Rafael Ramis, Ane Miren Salomon, Brenda Fundora, Ariane Araujo, Arantza Muguruza-Montero, Eider Nuñez, Scarlett Pérez-Olea, Christian Villanueva, Aritz Leonardo, Sonia Arrasate, Nuria Sotomayor, Alvaro Villarroel, Aitor Bergara, Esther Lete, Humberto González-Díaz

Título: Identification of Riluzole derivatives as novel calmodulin inhibitors with neuroprotective activity by a joint synthesis, biosensor, and computational guided strategy

Nombre revista: *Biomedicine & Pharmacotherapy*

Volumen: 174

Pág. inicial: 116602

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1

Autores: L. Xue, S. He, R.K. Singla, Q. Qin, Y. Ding, L. Liu, X. Ding, H. Bediaga, S. Arrasate Gil, A. Duardo-Sanchez, Y. Zhang, Z. Shen, B. Shen, L. Miao, Gonzalez-Díaz, H.

Título: Machine learning guided prediction of warfarin blood levels for personalized medicine based on clinical longitudinal data from cardiac surgery patients: a prospective observational study.

Nombre revista: INT J SURGERY

Volumen:

Pág. inicial:

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN: 1743-9191

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 15.3

Autores: S. He, K. Nader, J.S. Abarrategi, H. Bediaga, D. Nocedo-Mena, E. Ascencio, G.M. Casanola-Martin, I. Castellanos-Rubio, M. Insausti, B. Rasulev, S. Arrasate, and H. González-Díaz

Título: NANO.PTML Model for read-across prediction of nanosystems in neurosciences. Computational model and experimental case of study

Nombre revista: J. NANOBIOTECH.

Volumen:

Pág. inicial:

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN: 1477-3155

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 10.2

Autores: Yendrek Velásquez-López, Andrea Ruiz-Escudero, Sonia Arrasate, Humberto González-Díaz

Título: Implementation of IFPTML Computational Models in Drug Discovery Against Flaviviridae Family

Nombre revista: *Journal of Chemical Information and Modeling*

Volumen: 64 (6)

Pág. inicial: 1841

Pág. final: 1852

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil

Autores: He, Shan; Abarrategi, Julen Segura; Bediaga, Harbil ; Arrasate, Sonia ; Gonzalez-Diaz, Humberto

Título: On the additive artificial intelligence-based discovery of nanoparticle neurodegenerative disease drug delivery systems

Nombre revista: *Beilstein Journal of Nanotechnology*

Volumen: 15

Pág. inicial: 535

Pág. final: 555

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil

Autores: Ling Xue, Rajeev Singla, Shan He., Sonia Arrasate, Humberto González-Díaz, Liyan Miao, Bairong Shen

Título: Warfarin—A natural anticoagulant: A review of research trends for precision medication

Nombre revista: *Phytomedicine*

Volumen: 128

Pág. inicial: 155479

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil

Autores: Asier Larrea-Sebal, Iñaki Sasiain, Shifa Jebbari-Benslaiman, Unai Galicia-Garcia, Kepa B. Uribe, Asier Benito-Vicente, Irene Gracia-Rubio, Harbil Bediaga-Bañeres, Sonia Arrasate, Ana Cenarro, Fernando Civeira, Humberto González-Díaz, and Cesar Martín*

Título: OptiMo-LDLr: An Integrated In Silico Model with Enhanced Predictive Power for LDL Receptor Variants, Unraveling HotSpot Pathogenic Residues.

Nombre revista: *Adv. Sci.*

Volumen:

Pág. inicial: 2305177

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil

Autores: Carracedo-Reboredo, Paula; Aranzamendi, Eider; He, Shan; Arrasate, Sonia; Munteanu, Cristian R.; Fernandez-Lozano, Carlos; Sotomayor, Nuria; Lete, Esther; Gonzalez-Diaz, Humberto.

Título: MATEO: intermolecular α -amidoalkylation theoretical enantioselectivity optimization. Online tool for selection and design of chiral catalysts and products.

Nombre revista: *Journal of Cheminformatics*

Volumen: 16(1)

Pág. inicial: 9

Pág. final:

Año: **2024**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil

Autores: Harbil Bediaga, María Isabel Moreno, Sonia Arrasate, José Luis Vilas, Lucía Orbe, Elías Unzueta, Juan Pérez Mercader, Humberto González-Díaz

Título: Multi-output chemometrics model for gasoline compounding

Nombre revista: *Fuel*

Volumen: 310

Pág. inicial: 122274

Pág. final:

Año: **2022**

ISSN: 0016-2361

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q1, Impact Factor: 7.4

Autores: Larrea-Sebal A, Benito-Vicente A, Fernandez-Higuero JA, Jebari-Benslaiman S, Galicia-Garcia U, Uribe KB, Cenarro A, Ostolaza H, Civeira F, Arrasate S, González-Díaz H, Martín C.
 Título: MLb-LDLr: A Machine Learning Model for Predicting the Pathogenicity of LDLr Missense Variants.

Nombre revista: *JACC Basic Translational Science*.

Volumen: 22;6(11)

Pág. inicial: 815

Pág. final: 827

Año: **2021**

ISSN: 2452-302X

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 9.5

Autores: Sampaio-Dias, Ivo E.; Rodriguez-Borges, Jose E.; Yanez-Perez, Victor; Arrasate, Sonia; Llorente, Javier; Brea, Jose M.; Bediaga, Harbil; Vina, Dolores; Loza, Maria Isabel; Caamano, Olga; Xerardo García-Mera*, and Humberto González-Díaz

Título: Synthesis, Pharmacological and Biological Evaluation of 2-Furoyl-based MIF-1 Peptidomimetics, and the Development of a General-Purpose Model for Allosteric Modulators (ALLOPTML)

Nombre revista: *ACS Chemical Neuroscience*,

Volumen: 12(1)

Pág. inicial: 203

Pág. final: 215

Año: **2021**

ISSN: 1948-7193

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 5.78

Autores: Nocedo-Mena, Deyani; Arrasate, Sonia; Garza-Gonzalez, Elvira; Rivas-Galindo, Veronica M.; Romo-Mancillas, Antonio; Munteanu, Cristian R.; Sotomayor, Nuria; Lete, Esther; Barbolla, Iratxe; Martin, Cesar A.; Camacho-Corona, María del Rayo

Título: Molecular docking, SAR analysis and biophysical approaches in the study of the antibacterial activity of ceramides isolated from *Cissus incisa*

Nombre revista: *Bioorg Chem*.

Volumen: 109

Pág. inicial: 104745

Pág. final:

Año: 2021

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 5.3

Autores: Barbolla, Iratxe; Hernandez-Suarez, Leidi; Quevedo-Tumaili, Viviana; Nocedo-Mena, Deyani; Arrasate, Sonia; Dea-Ayuela, Maria Auxiliadora; Gonzalez-Diaz, Humberto; Sotomayor, Nuria; Lete, Esther

Título: Palladium-mediated synthesis and biological evaluation of C-10b substituted Dihydropyrrolo[1,2-b]isoquinolines as antileishmanial agents

Nombre revista: *European Journal of Medicinal Chemistry*

Volumen: 220

Pág. inicial: 113458

Pág. final:

Año: **2021**

ISSN:

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 7.09

Autores: Urista, Diana V.; Carrue, Diego B.; Otero, Iago; Arrasate, Sonia; Quevedo-Tumaili, Viviana F.; Gestal, Marcos; Gonzalez-Diaz, Humbert; Munteanu, Cristian R

Título: Prediction of antimalarial drug-decorated nanoparticle delivery systems with random forest models

Nombre revista: *Biology (Basel, Switzerland)*

Volumen: 9(8)

Pág. inicial: 198 (1/15)

Pág. final: 198 (15/15)

Año: **2020**

ISSN: 2079-7737

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 5.079

Autores: Ortega-Tenezaca, Bernabe; Quevedo-Tumaili, Viviana; Bediaga, Harbil; Collados, Jon; Arrasate, Sonia; Madariaga, Gotzon; Munteanu, Cristian R.; D. S. Cordeiro, M. Natalia; Gonzalez-Diaz, Humbert.

Título: PTML Multi-Label Algorithms: Models, Software, and Applications

Nombre revista: Current Topics in Medicinal Chemistry

Volumen: 5(42) Pág. inicial: 27211 Pág. final: 27220 Año: **2020**

ISSN: 1568-0266

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q2, Impact Factor: 3.295

Autores: Cabrera-Andrade, Alejandro; Lopez-Cortes, Andres; Munteanu, Cristian R.; Pazos, Alejandro; Perez-Castillo, Yunierkis; Tejera, Eduardo; Arrasate, Sonia; Gonzalez-Diaz, Humbert

Título: Perturbation-Theory Machine Learning (PTML) Multilabel Model of the ChEMBL Dataset of Preclinical Assays for Antisarcoma Compounds

Nombre revista: ACS Omega

Volumen: 5(42) Pág. inicial: 27211 Pág. final: 27220 Año: **2020**

ISSN: 2470-1343

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 3.512

Autores: R. Santana, R. Zuluaga, P. Gañán, S. Arrasate, E. Onieva, and H. González-Díaz

Título: Predicting coated-nanoparticle drug release systems with perturbation-theory machine learning (PTML) models

Nombre revista:

Volumen: 12(25) Pág. inicial: 13471 Pág. final: 13483 Año: **2020**

ISSN: 2040-3372

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 7.790

Autores: R. Santana, R. Zuluaga, P. Gañán, S. Arrasate, E. Onieva, M. M. Montemore and H. González-Díaz

Título: PTML Model for Selection of Nanoparticles, Anticancer Drugs, and Vitamins in the Design of Drug-Vitamin Nanoparticle Release Systems for Cancer Cootherapy

Nombre revista: Molecular Pharmaceutics

Volumen: 17(7) Pág. inicial: 2612 Pág. final: 2627 Año: **2020**

ISSN: 1543-8384

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 4.939

Autores: R. Santana, R. Zuluaga, P. Gañán, S. Arrasate, E. Onieva, and H. González-Díaz

Título: PTML Model of ChEMBL Compounds Assays for Vitamin Derivatives.

Nombre revista: ACS Combinatorial Science

Volumen: 22, Pág. inicial: 129 Pág. final: 141 Año: **2020**

ISSN: 21568944

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos

Cuartil: Q1, Impact Factor: 3.381

Autores: Montes-Bageneta, I., Akesolo U., López S., Merino M., Anakabe E., Arrasate S.

Título: Pollutants in Organic Chemistry & Medicinal Chemistry Education Laboratory. Experimental and Machine Learning Studies

Nombre revista: Curr. Top. Med. Chem.

Volumen: 20(9) Pág. inicial: 720 Pág. final: 730 Año: **2020**

ISSN: 1873-4294

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q2, Impact Factor: 3.442

Autores: Carracedo-Reboredo P, Corona R, Martinez-Nunes M, Fernandez-Lozano C, Tsiliki G, Sarimveis H, Aranzamendi E, Arrasate S, Sotomayor N, Lete E, Munteanu CR, González-Díaz H.

Título: MCDCalc: Markov Chain Molecular Descriptors Calculator for Medicinal Chemistry

Nombre revista: Curr. Top. Med. Chem

Volumen: 20

Pág. inicial: 305

Pág. final: 317

Año: **2020**

ISSN: 1873-4294

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q2, Impact Factor: 3.442

Autores: R. Díez-Alarcia, V. Yáñez-Pérez, I. Muneta-Arrate, S. Arrasate, E. Lete, J.J. Meana, and H. González-Díaz

Título: Big Data Challenges Targeting Proteins in GPCR Signaling Pathways; Combining PTML-ChEMBL Models and [35S]GTP γ S Binding Assays

Nombre revista: ACS Chem Neurosci

Volumen: 10(11)

Pág. inicial: 4476

Pág. final: 4491

Año: **2019**

ISSN: 1948-7193

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q1, Impact Factor: 3.861

Autores: R. Santana, R. Zuluaga, P. Gañán, S. Arrasate, E. Onieva, and H. González-Díaz

Título: Designing Nanoparticle Release Systems for Drug-Vitamin Cancer Co-Therapy with Multiplicative Perturbation-Theory Machine Learning (PTML) Models.

Nombre revista: Nanoscale

Volumen: 11

Pág. inicial: 21811

Pág. final: 21823

Año: **2019**

ISSN: 2040-3372

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q1, Decile: D1, Impact Factor: 6.97

Autores: S. Arrasate, A. Duardo-Sánchez, I. De Miguel Beriain, C. Romeo Casabona, and H. González-Díaz.

Título: New Experimental and Computational Tools for Drug Discovery: Medicinal Chemistry, Personalized Medicine, Ethical & Legal Issues. Part - V,

Nombre revista: Curr. Top. Med. Chem.

Volumen: 18(25)

Pág. inicial: 2141

Pág. final: 2142

Año: **2018**

ISSN: 1873-4294

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos
Cuartil: Q2, Impact Factor: 3.442.

Autores: Arrasate S, Duardo-Sanchez A.

Título: Perturbation Theory Machine Learning Models: Theory, Regulatory Issues, and Applications to Organic Synthesis, Medicinal Chemistry, Protein Research, and Technology.

Nombre revista: Curr. Top. Med. Chem.

Volumen: 18(14)

Pág. inicial: 1203

Pág. final: 1213

Año: **2018**

ISSN: 1873-4294

Lugar de publicación:

Indicios de calidad: Base de datos: Web of Science
Cuartil: Q2, Impact Factor: 3.442.

C.2. Otras publicaciones

CLAVE: L= libro completo, CL= capítulo de libro, A= artículo, R= revisión, E= editor, S= documento científico-técnico restringido, O= otras (especificar).

Autores:

Título:

Nombre revista/Título libro:

Clave:

Volumen:

Pág. inicial:

Pág. final:

Año:

Editorial (si libro):

Lugar de publicación:

Indicios de calidad:

C.3. Contribuciones a congresos, conferencias científicas y seminarios

Indique un máximo de 10 contribuciones

Autores: Shan He*, Harbil Bediaga, Sonia Arrasate, Bairong Shen, Humberto González

Título: NANO.PTML Models for read-across prediction of drug delivery nanosystems.

Tipo de participación: Oral (20 minutes)

Congreso: International Workshop on Artificial Intelligence New Paradigms in Bioinformatics

Publicación:

Lugar de celebración: multi-site, presentially on all sites and connected, A Coruña (CITIC), Santiago de Compostela (CiMUS), Leioa (IKERDATA S.L.), Greece (Piraeus), A Coruña (RNAS-IMEDIR) Fecha: julio 9, 2024

Autores: Mainer Baltasar*, Harbil Bediaga, Sonia Arrasate, Humberto González

Título: NET.IFPTML for prediction of drug activity in different brain regions

Tipo de participación: Oral (20 minutes)

Congreso: International Workshop on Artificial Intelligence New Paradigms in Bioinformatics

Publicación:

Lugar de celebración: multi-site, presentially on all sites and connected, A Coruña (CITIC), Santiago de Compostela (CiMUS), Leioa (IKERDATA S.L.), Greece (Piraeus), A Coruña (RNAS-IMEDIR) Fecha: julio 9, 2024

Autores: Estefanía Ascencio*, Harbil Bediaga, Sonia Arrasate, Humberto González

Título: PCR.PTML Models for anti-biotics drug design in presonalized medicine

Tipo de participación: Oral (20 minutes)

Congreso: International Workshop on Artificial Intelligence New Paradigms in Bioinformatics

Publicación:

Lugar de celebración: multi-site, presentially on all sites and connected, A Coruña (CITIC), Santiago de Compostela (CiMUS), Leioa (IKERDATA S.L.), Greece (Piraeus), A Coruña (RNAS-IMEDIR) Fecha: julio 9, 2024

Autores: Yendrek Velasquez*, Harbil Bediaga, Sonia Arrasate, Humberto González

Título: IFPTML Models for anti-parasite drugs discovery and computationally directed synthesis

Tipo de participación: Oral (20 minutes)

Congreso: International Workshop on Artificial Intelligence New Paradigms in Bioinformatics

Publicación:

Lugar de celebración: multi-site, presentially on all sites and connected, A Coruña (CITIC), Santiago de Compostela (CiMUS), Leioa (IKERDATA S.L.), Greece (Piraeus), A Coruña (RNAS-IMEDIR) Fecha: julio 9, 2024

Autores: Shan He, Gerardo M. Casanola-Martin, Bakhtiyor Rasulev, Cristian R. Munteanu, Sonia Arrasate, and Humberto González-Díaz

Título: Human Colon Cancer Dual Active Drug – Metal Organic Framework Nano-Material Systems: Dataset Compilation and Artificial Intelligence Modeling

Tipo de participación: poster

Congreso: 2023 Conference on Computational Science

Publicación:

Lugar de celebración: Fargo, North Dakota, United States

Fecha: October 18, 2023

Autores: Estefania Asencio-Medina, Carmen Velásquez, Amaia González-Magaña, Maria D. Pastor-Vivero, Laura Acosta, Aliuska Duardo-Sánchez, Sonia Arrasate, Humberto González-Díaz, and David Albasa-Jové

Título: PCR IF+PT+ML metagenomic study of lung microbiome in cystic fibrosis: Toward GDPR personalized medicine compliant decision making

Tipo de participación: poster

Congreso: 2023 Conference on Computational Science

Publicación:

Lugar de celebración: Fargo, North Dakota, United States,

Fecha: October 18, 2023

Autores: *Harbil Bediaga, Sonia Arrasate, and Humbert Gonzalez-Díaz*

Título: PTML Combinatorial Model for Cancer

Tipo de participación: poster

Congreso: X Spanish Drug Discovery Network

Publicación:

Lugar de celebración: Bilbao

Fecha: 2018

Autores: S.Pérez, C. Villanueva, S. Arrasate, H. González

Título: Drug protein interaction and its biological activity in the treatment of Alzheimer's disease

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: Mol2Net

Publicación:

Lugar de celebración: online

Fecha: 2018

Autores: I. Montes, S. Arrasate, E. Anakabe, M. Merino, U. Akesolo, S. López

Título: Sustainability Transformation in Teaching Organic Chemistry Laboratory at University of the Basque Country

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: Mol2Net

Publicación:

Lugar de celebración: online

Fecha: 2018

Autores: I. Montes Bageneta, S. Arrasate Gil, E. Anakabe Iturriaga, H. Gonzalez-Díaz, M. Merino Maestre, U. Akesolo Muguruza, S. López Cadahia

Título: Implementing Sustainable Development Skills In Teaching Organic Chemistry Laboratory

Tipo de participación: Comunicación

Congreso: EuroSciCon

Publicación:

Lugar de celebración: Budapest, Hungary

Fecha: 2018

C.4. Proyectos de investigación

Título del proyecto: Strategies for 3d-metal-catalyzed C-H activation. Synthetic applications and Machine Learning approaches for chemical reactivity and biological activity (SYML)

Entidad financiadora (convocatoria): MICCIN PID2022-137365NB-I00.

Subvención concedida: 187500 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): septiembre 2023

Fecha fin (dd/mm/aa): agosto 2026

Investigador/a principal: Nuria Sotomayor, Esther Lete

Título del proyecto: IKERDATA-INVESTIGO: IFPTML Artificial Intelligence, Cheminformatics, Nanotechnology, and Neuroscience Drug Discovery Training and Research Program 2022-2024.

Entidad financiadora (convocatoria): European Commission, NextGenerationEU Funds Ref. IKERDATA-2022-04.

Subvención concedida: 264.871,36 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): septiembre 2022

Fecha fin (dd/mm/aa): junio 2024

Investigador/a principal: Humberto González-Díaz, Sonia Arrasate Gil

Título del proyecto: New synthetic and cheminformatic tools for the construction and diversification of drug-like heterocycles. C-H activation and Machine Learning approaches

Entidad financiadora (convocatoria): MICCIN PID2019-104148GB-I00

Subvención concedida: 96800,00 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): junio 2020

Fecha fin (dd/mm/aa): junio 2023

Investigador/a principal: Esther Lete, Nuria Sotomayor

Título del proyecto: Catálisis metálica y organocatálisis. Nuevos métodos sostenibles de síntesis de moléculas con aplicaciones en salud y ciencia de materiales. Ayudas Grupos de Investigación Consolidados del Sistema Universitario Vasco 2022

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco (IT1558-2)

Subvención concedida:

Fecha inicio (dd/mm/aa): enero 2022

Fecha fin (dd/mm/aa): Diciembre de 2025

Investigador/a principal: José Luis Vicario, Esther Lete

Título del proyecto: Strategies for 3d-metal-catalyzed C-H activation. Synthetic applications and Machine Learning approaches for chemical reactivity and biological activity (SYML)

Entidad financiadora (convocatoria): MICCIN PID2022-137365NB-I00

Subvención concedida: 187500 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): septiembre 2023

Fecha fin (dd/mm/aa): agosto 2026

Investigador/a principal: Nuria Sotomayor, Esther Lete

Título del proyecto: Artificial Intelligence (AI) Guided Platform for Experimental Synthesis and Preclinical Assay of Metal-Organic Frameworks (MOF) Drug Release Systems for Gastrointestinal (GI) Cancer Treatment and Prevention AIMOFGIT

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco, Departamento de Industria (KK-2022/00032)

Subvención concedida: 552000 Eur

Fecha inicio (dd/mm/aa): enero 2022

Fecha fin (dd/mm/aa): diciembre 2023

Investigador/a principal: O. Castillo (Subproyecto PI Humberto González Díaz)

Título del proyecto: Red Enfermedades Raras CSIC (RER CSIC)

Entidad financiadora (convocatoria): CSIC, 202420E019

Subvención concedida: 125550 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): enero 2024

Fecha fin (dd/mm/aa): junio 2025

Investigador/a principal: Pilar López Larrubia (Subproyecto PI Humberto González Díaz)

Título del proyecto: CardiCaM - Plataforma Integrada Para El Descubrimiento De Candidatos Para Calmodunopatías.

Entidad financiadora (convocatoria): ELKARTEK 2020/Gobierno Vasco, CardiCaM (KK-2020/00110)

Subvención concedida: 82.746,60€

Fecha inicio (dd/mm/aa): 1/1/2020

Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2021

Investigador/a principal: Alvaro Villaroel (Subproyecto PI Humberto González Díaz)

Título del proyecto: CHAIN: Computational prediction of eco-friendly alternative building-blocks for fuel blends in petro-chemistry with Perturbation-Theory Machine Learning (TPML) model.

Entidad financiadora (convocatoria): PETRONOR S.A.-UPV/EHU/Gobierno Vasco ELKARTEK 2020/Gobierno Vasco, CHAIN KK-2019/00037)

Fecha inicio (dd/mm/aa): 1/1/2019

Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2020

Investigador/a principal: José Luis Vilas (Subproyecto PI Humberto González Díaz)

Título del proyecto: Reacciones de activación C-H catalizadas por metales de transición en síntesis y funcionalización de heterociclos. Nuevas aplicaciones sintéticas y modelos computacionales.

Entidad financiadora (convocatoria): MINECO, CTQ2016-74881-P

Subvención concedida: 89000

Fecha inicio (dd/mm/aa): 1/1/2017

Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2019

Investigador/a principal: Nuria Sotomayor, Esther Lete

Título del proyecto: Ayudas para apoyar las actividades de los grupos de investigación del sistema universitario vasco.

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco/Eusko Jaurlaritza, IT1045-16

Subvención concedida: 209589

Fecha inicio (dd/mm/aa): 1/1/2016

Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2021

Investigador/a principal: Nuria Sotomayor, Esther Lete

Título del proyecto: Desarrollo de una plataforma para el descubrimiento de fármacos dirigidos a enfermedades neuropsiquiátricas (PHAIKER).

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco. Programa de apoyo a la investigación colaborativa en áreas estratégicas, ELKARTEK 2017

Subvención concedida: 209589

Fecha inicio (dd/mm/aa): 1/1/2017

Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2018

Investigador/a principal: Javier Meana, Subproyecto Esther Lete

C.5. Contratos de I+D con empresas y/o administraciones

Título del contrato: CHAIN: Computational prediction of eco-friendly alternative building-blocks for fuel blends in petro-chemistry with Perturbation-Theory Machine Learning (TPML) model

Tipo de contrato: asociado al proyecto ELKARTEK CHAIN

Entidad financiadora (convocatoria): PETRONOR S.A.-UPV/EHU/Gobierno Vasco

Importe del contrato: 500000

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2019

Fecha fin (dd/mm/aa): 2021

Investigador/a principal: González-Díaz, H. (UPV/EHU), L. Orbe-Guijarro. (PETRONOR.SA).

Título del contrato: Development of a platform for the discovery of drugs for neuropsychiatric diseases (PHAIKER)

Tipo de contrato: asociado al proyecto ELKARTEK PHAIKER

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco, PHAIKER (ELKARTEK 2017, KK2017/00023)

Importe del contrato: 35991 Eur

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2017

Fecha fin (dd/mm/aa): 2018

Investigador/a principal: E. Lete, Javier Meana (Farmacología)

Título del contrato: Plataforma Integrada para el Descubrimiento de Candidatos para Calmodunopatías (CardiCaM)" Gobierno Vasco. Programa de apoyo a la investigación colaborativa en áreas estratégicas.

Tipo de contrato: asociado al proyecto ELKARTEK CardiCaM

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco, CardiCaM (ELKARTEK 2020)

Importe del contrato: 82746,60 Eur.

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2020

Fecha fin (dd/mm/aa): 2022

Investigador/a principal: Center: A. Villaroel (Biofisika CSIC-UPVEHU), F. Goñi (GAIKER), A. Juarros (TEKNIKER), González-Díaz, H. (UPV/EHU, Org. Inorg. Chem.), A. Leonardo (DIPC)TEKNIKER, GAIKER.

Título del contrato: Artificial Intelligence (AI) Guided Platform for Experimental Synthesis and Preclinical Assay of Metal-Organic Frameworks (MOF) Drug Release Systems for Gastrointestinal (GI) Cancer Treatment and Prevention AIMOFGIFT

Tipo de contrato: asociado al proyecto ELKARTEK AIMOFGIFT

Entidad financiadora (convocatoria): Gobierno Vasco, AIMOFGIFT (KK-2022/00032)

Importe del contrato: 99220 Eur

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2022

Fecha fin (dd/mm/aa): 2024

Investigador/a principal: Center: O. Castillo (BC Materials), M. Esteras, M. Obach (TEKNALIA), González-Díaz, H. (UPV/EHU, Org. Inorg. Chem.), Biodonostia y Biobizkaia.

Título del contrato: Consulting for Startups on AI and Chemoinformatics for Drug Discovery, New Materials Design, and Young Researchers training.

Tipo de contrato: UPV/EHU-OTRI Consulting Contracts

Entidad financiadora (convocatoria): Office of Transference of Research and Innovation (OTRI), UPV/EHU

Importe del contrato: 10984.62 Eur

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2022

Fecha fin (dd/mm/aa): 2023

Investigador/a principal: Humberto González y Sonia Arrasate

C.6. Patentes y modelos de utilidad

Inventores:

Título:

Nº de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

C.7. Dirección de tesis doctorales

Título: Modelos bioinformáticos para la predicción de compuestos biológicamente activos en cáncer de colon.

Doctorando: Paula Carracedo Reboredo

Universidad: UDC

Escuela de Doctorado:

Departamento/Programa de Doctorado: Tecnoloxías da Información e das Comunicaciós (5032V01) (TIC)

Directores/as: Carlos Fernández Lozano y Sonia Arrasate Gil

Calificación: Sobresaliente *Cum Laude*

Año: 2023 (2023/10/27)

Título: LIFE.PTML Information Fusion and Encoding, Perturbation Theory, and Machine Learning Study of Preclinical Assays, Clinical Trials, and Epidemiology of Anti-HIV compounds.

Doctorando: Fernando Eiras Abalde

Universidad: UPV/EHU

Escuela de Doctorado:

Departamento/Programa de Doctorado: Farmacología

Directores/as: Humberto González Díaz y Sonia Arrasate Gil

Calificación: Sobresaliente *Cum Laude*

Año: 2024 (2024/04/26)

Título: Bioinformatics of Warfarin personalized medicine for cardiac surgery patients.

Doctorando: Ling Xue

Universidad: UPV/EHU

Escuela de Doctorado:

Departamento/Programa de Doctorado: Farmacología

Directores/as: Bairong Shen y Sonia Arrasate Gil

Calificación: Sobresaliente *Cum Laude*

Año: 2025 (2025/07/24)

C.8. Estancias en centros de I+D

Entidad/Centro:

Localidad:

País:

Año:

Duración (semanas):

Nombre del programa:

Objetivos:

C.9. Participación en comités científicos, técnicos y/o asesores

Nombre del comité: MOL2NET International Conference Series on Multidisciplinary Science, Sciforum, MDPI, Basel, Switzerland, HQs UPV/EHU, Bilbao, España.

Cargo: President of Scientific Committee in Experimental Sciences section

Entidad de afiliación: UPV/EHU

Ámbito: Química, Química Orgánica, Química Médica, Quimioinformática, Nanotecnología, Start ups

Tipo de participación: Conferencia con 300+ participantes, 20+ países, autores y/o miembros del comité de instituciones como: University of Harvard, Stanford University, Virginia Commonwealth University, CNAM París, University of Miami, University of Minnesota, University of Pennsylvania, Oregon State University, EMBL-EBI, IKERBASQUE, , Universidad de Santiago de Compostela, etc. Ediciones: 2015, 2016, 2017-actualidad. President of Scientific Committee in Experimental Sciences section.

Fecha inicio (dd/mm/aa): 01/01/2015 Fecha fin (dd/mm/aa): 31/12/2023

Nombre del comité: Comité de Expertos de la Cátedra UNESCO sobre Desarrollo Sostenible y Educación Ambiental de la UPV/EHU

Cargo: Experto en temas relacionados con la Sostenibilidad dentro del área de Química

Entidad de afiliación: UPV/EHU

Ámbito: Desarrollo Sostenible y Educación Ambiental

Tipo de participación:

Fecha inicio (dd/mm/aa): 01/01/2005 Fecha fin (dd/mm/aa): actualidad

Nombre del comité: USEDAT-2019. USA-Europe Data Analysis Training Worldwide Program. Course: Perturbation-Theory Machine Learning in Medicinal Chemistry, Biomedical Engineering, and Nanotechnology. Type of Course: Hands-on Training Internship.

Cargo: Experto en temas relacionados con la Sostenibilidad dentro del área de Química

Entidad de afiliación: UPV/EHU

Ámbito: USEDAT-2019: USA-Europe Data Analysis Training Worldwide Program. Course: Perturbation-Theory Machine Learning in Medicinal Chemistry, Biomedical Engineering, and Nanotechnology. Type of Course: Hands-on Training Internship. USEDAT Sponsors: IKERBASQUE, PANELFIT H2020 Europe Commission Project, SPRI ELKARTEK, REPSOL-PETRONOR, MDPI Switzerland, NASA STEM-SPACE Grant P03C1160161, FCT Portugal, NSF China, COLCIENCIAS Colombia, SENESCYT Ecuador, CONACYT, DELFIN Program México, etc. Students Enrolled: 10, Students Nationality: Spain, Mexico, Ecuador, Cuba. Duration: 2019-Jun-15 to 2019-Jul-25, Contact Hours: 30h, Approx. Workload (Credits): 3 ECTS. Place: UPV/EHU, Dept. Org. Chem. II. , Leioa, Biscay, Spain. Lecturers: Prof. H. González-Díaz, and Prof. S. Arrasate Project web: <https://www.researchgate.net/project/USEDAT-USA-EU-Data-Analysis-Training-Prog>

Tipo de participación: Hands-on Training Internship

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2019 Fecha fin (dd/mm/aa): actualidad

C.10. Organización y gestión de actividades de I+D+i

Título: MOL2NET International Conference Series on Multidisciplinary Science, Sciforum, MDPI, Basel, Switzerland, HQs UPV/EHU, Bilbao, España. Cargo: **President of Scientific Committee in Experimental Sciences section.**

Tipo de actividad: Organización de congreso científico-tecnológico. Scientific Committee in Experimental Sciences section Conferencia con 300+ participantes, 20+ países, autores y/o miembros del comité de instituciones como: University of Harvard, Stanford University, Virginia Commonwealth University, CNAM París, University of Miami, University of Minnesota, University of Pennsylvania, Oregon State University, EMBL-EBI, IKERBASQUE, UPV/EHU, Universidad de Santiago de Compostela, etc.

Ámbito: Internacional e interdisciplinar. Áreas de Chemistry, nanoscience, medicine, biochemistry, materials.

Funciones desempeñadas: coorganización junto con el investigador IkerBasque Humberto González-Díaz

Fecha inicio (dd/mm/aa): 2015

Fecha fin (dd/mm/aa): 2023

MOTIVOS POR LOS QUE SE INCREMENTA EL PERIODO DE 6 AÑOS A TENER EN CUENTA PARA LOS MÉRITOS MÁS RELEVANTES:

Justificar aquí los motivos y, en su caso, adjuntar la documentación probatoria.