



ION MITXELENA ECHEVERRIA

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 21/06/2024

v 1.4.3

b2e0b40dbb476933beed244d7a052660

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.

Desde 2010 hasta 2014 cursé mis estudios de Grado en Física en la Universidad del País Vasco (UPV/EHU), donde obtuve 6 matrículas de honor y una nota media de 8.66. El último curso disfruté del programa SICUE, finalizando mis estudios en la Universidad de Santiago de Compostela. Destacar que el trabajo fin de Grado, en el cual estudié desde un punto de vista científico el tráfico en el campus de Lejona de la UPV/EHU, fue posteriormente aplicado dando fin a los atascos en la Universidad gracias a una mejora en el tráfico de un 30%, obteniendo posteriormente el reconocimiento por parte del Rectorado.

Durante 2014-2016 cursé el Máster Universitario Internacional 'Química Teórica y Modelización Computacional' de 120 ECTS enmarcado en un programa Europeo (TCCM). Presencialmente, llevé a cabo estos estudios en las Universidades de Barcelona, Zaragoza, Groningen (Países Bajos), y Leuven (Bélgica). Obtuve una beca de Colaboración del Ministerio de Educación y Ciencia (MEC) para iniciarme en tareas de investigación. También formé parte de dos proyectos de investigación como investigador (no doctor) de la UPV/EHU.

En 2016, recibí una beca predoctoral de la UPV/EHU para realizar una tesis doctoral supervisada por el Prof. Dr. Mario Piris (investigador IKERBASQUE). En Octubre-Diciembre 2017, disfruté de una estancia de investigación con el Prof. A. D. E. DePrince en la Universidad de Florida (Florida State University), Tallahassee, Florida (EEUU). En Septiembre 2019, llevé a cabo otra colaboración científica con el investigador Klaas J. H. Giesbertz en la "Vrije Universiteit" de Amsterdam (Países Bajos). Defendí mi tesis doctoral el día 31 de Marzo de 2020, con un total de 10 artículos científicos y un capítulo de libro publicados, así como la publicación de DoNOF, un software libre de estructura electrónica. Obtuve las menciones Cum Laude y Doctorado Internacional.

Durante Abril-Mayo de 2020, gracias a una estancia como investigador visitante en el 'Donostia International Physics Center', finalicé mis trabajos con el Prof. Dr. Mario Piris dando lugar a dos nuevas publicaciones. Seguidamente inicié una nueva línea de investigación con el Dr. David De Sancho (investigador Ramón y Cajal), desarrollada durante Julio 2020-Marzo 2022 en régimen de investigador doctor en la UPV/EHU. Finalmente, he trabajado como laboral interino en la UPV/EHU en el curso 2022/23 y actualmente hago lo propio en la Universidad de La Rioja, donde combino tareas de investigación con docencia (principalmente Física y Química Física).

**ION MITXELENA ECHEVERRIA**

Apellidos: **MITXELENA ECHEVERRIA**
Nombre: **ION**
DNI: **44649148-F**
Fecha de nacimiento: **20/12/1992**
Sexo: **Hombre**
Teléfono fijo: **+34 616669636**
Correo electrónico: **ifrentzua@gmail.com**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de La Rioja **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Química, Complejo científico tecnológico
Categoría profesional: Profesor Sustituto
Fecha de inicio: 04/09/2023
Modalidad de contrato: Contrato laboral temporal **Régimen de dedicación:** Tiempo parcial
Funciones desempeñadas: Contratado como profesor sustituto en el departamento de Química con el objetivo de impartir la asignatura de Física y Didáctica de las Ciencias Experimentales.

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad del País Vasco	Laboral Interino de Universidad	05/01/2023
2	Universidad del País Vasco	Laboral Interino de Universidad	06/10/2022
3	Universidad del País Vasco	Investigador Doctor	01/04/2021
4	Universidad del País Vasco	Investigador Doctor	01/07/2020
5	Donostia International Physics Center	Investigador Visitante	01/03/2020
6	Universidad del País Vasco	Investigador Predoctoral	01/03/2016
7	Universidad del País Vasco	Investigador No Doctor	04/11/2014

1 **Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad Vasco
Categoría profesional: Laboral Interino de Universidad
Fecha de inicio-fin: 05/01/2023 - 03/05/2023 **Duración:** 3 meses - 29 días

2 **Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad Vasco
Categoría profesional: Laboral Interino de Universidad
Fecha de inicio-fin: 06/10/2022 - 04/01/2023 **Duración:** 2 meses - 30 días



- | | | |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| 3 | Entidad empleadora: Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigador Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/04/2021 - 31/03/2022 | Tipo de entidad: Universidad

Duración: 1 año |
| 4 | Entidad empleadora: Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigador Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/07/2020 - 30/03/2021 | Tipo de entidad: Universidad

Duración: 8 meses - 30 días |
| 5 | Entidad empleadora: Donostia International Physics Center
Categoría profesional: Investigador Visitante
Fecha de inicio-fin: 01/03/2020 - 30/06/2020 | Tipo de entidad: Research center

Duración: 4 meses |
| 6 | Entidad empleadora: Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigador Predoctoral
Fecha de inicio-fin: 01/03/2016 - 29/02/2020 | Tipo de entidad: Universidad

Duración: 4 años |
| 7 | Entidad empleadora: Universidad del País Vasco
Categoría profesional: Investigador No Doctor
Fecha de inicio-fin: 04/11/2014 - 31/07/2015 | Tipo de entidad: Universidad

Duración: 8 meses - 28 días |



Formación académica recibida

Titulación universitaria

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

- 1 Titulación universitaria:** Titulado Superior
Nombre del título: Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional
Entidad de titulación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de titulación: 01/04/2016
- 2 Titulación universitaria:** Titulado Superior
Nombre del título: PCEO Grado en Física / Grado en Matemáticas
Entidad de titulación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de titulación: 07/07/2014

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Programa Oficial de Posgrado en Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Entidad de titulación: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de titulación: 31/03/2020
Título de la tesis: Development and Applications of Natural Orbital Functional Theory
Director/a de tesis: Mario Piris Silvera
Calificación obtenida: Matrícula de Honor, Premio Extraordinario Internacional

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Euskera	C1	C1	C1	C1	C1
Inglés	C1	C1	C1	C1	C1
Español	C2	C2	C2	C2	C2

Actividad docente



Formación académica impartida

- Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación en Química Física / 2do curso
Titulación universitaria: Graduado o Graduada en Química
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Física / 1er curso
Titulación universitaria: Grado en Enología
Entidad de realización: Universidad de La Rioja **Tipo de entidad:** Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Física / 1er curso
Titulación universitaria: Graduado o Graduada en Ingeniería Agrícola
Entidad de realización: Universidad de La Rioja **Tipo de entidad:** Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Física / 1er curso
Titulación universitaria: Graduado o Graduada en Química
Entidad de realización: Universidad de La Rioja **Tipo de entidad:** Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Linux y Linux de Gestión
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
- Nombre de la asignatura/curso:** Química Física II / 3er curso
Titulación universitaria: Graduado o Graduada en Química
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

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

- Nombre del proyecto:** FUERZAS MOLECULARES EN PROTEÍNAS INTRÍNSECAMENTE DESORDENADAS (código externo: PID2021- 127907NB- I00)
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio-fin: 01/09/2022 - 31/08/2025
Cuantía total: 139.150 €
- Nombre del proyecto:** KIMIKA TEORIKOA. AVANCES EN QUÍMICA CUÁNTICA: AVANCES TEÓRICOS Y APLICACIÓN EN BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL, NANOCIENCIA Y MATERIALES POLIMÉRICOS (código externo: IT1254-19))
Entidad de realización: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de inicio-fin: 01/01/2019 - 31/12/2021
Cuantía total: 254.714 €



3 **Nombre del proyecto:** QUÍMICA CUÁNTICA, BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL, NANOTECNOLOGÍA, EXPLOSIONES CULÓMBICAS, TEORÍA DEL FUNCIONAL DE ORBITALES NATURALES (código externo: IT588-13)

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

Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2018

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Índice H: 11

Fecha de aplicación: 21/06/2024

Fuente de Índice H: GOOGLE SCHOLAR

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Ion Mitxelena; Mario Piris. Assessing the global natural orbital functional approximation on model systems with strong correlation. J. Chem. Phys.160, pp. 204106. 22/05/2024.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Sí
- 2** Ion Mitxelena Echeverria; Mario Piris Silvera. Benchmarking GNOF against FCI in challenging systems in one, two, and three dimensions. J. Chem. Phys.156, pp. 214102. 15/05/2022.
Tipo de producción: Artículo científico
Autor de correspondencia: No
- 3** Mauricio Rodríguez Mayorga; Ion Mitxelena Echeverria; Fabien Bruneval; Mario Piris Silvera. Coupling Natural Orbital Functional Theory and Many-Body Perturbation Theory by Using Nondynamically Correlated Canonical Orbitals. J. Chem. Theory Comput.17, pp. 7562 - 7574. 21/11/2021.
Tipo de producción: Artículo científico
Autor de correspondencia: No
- 4** Ion Mitxelena Echeverria; David De Sancho. Markov state models from hierarchical density-based assignment. J. Chem. Phys.155, pp. 054102. 13/07/2021.
Tipo de producción: Artículo científico
Autor de correspondencia: No
- 5** Mario Piris Silvera; Ion Mitxelena Echeverria. DoNOF: an open-source implementation of natural-orbital-functional-based methods for quantum chemistry. Comp. Phys. Comm.259, pp. 107651. 01/01/2021.
Tipo de producción: Artículo científico
Autor de correspondencia: No
- 6** Ion Mitxelena; Mario Piris. Analytic gradients for spin multiplets in natural orbital functional theory. J. Chem. Phys.153, pp. 044101. 22/07/2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No



- 7** Ion Mitxelena; Mario Piris. An efficient method for strongly correlated electrons in two-dimensions. J. Chem. Phys. 152, pp. 064108. 12/02/2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 8** Ion Mitxelena; Mario Piris. An efficient method for strongly correlated electrons in one-dimension. J. Phys.: Condens. Matter. 32, pp. 17LT01. 28/01/2020.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 9** Nam Vu; Ion Mitxelena; Eugene DePrince III. An adiabatic connection for doubly-occupied configuration interaction wave functions. J. Chem. Phys. 151, pp. 244121. 30/12/2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 10** Raul Quintero Monsebaiz; Ion Mitxelena; Mauricio Rodríguez Mayorga; Alberto Vela; Mario Piris. Natural orbital functional for spin-polarized periodic systems. J. Phys.: Condens. Matter. 31 - 16, pp. 165501. 21/02/2019.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 11** Ion Mitxelena; Mauricio Rodríguez-Mayorga; Mario Piris. Phase Dilemma in Natural Orbital Functional Theory from the N-representability Perspective. European Physical Journal B. 17/04/2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 12** Ion Mitxelena Echeverria; Mario Piris Silvera; Mauricio Rodríguez Mayorga. Corrigendum: On the performance of natural orbital functional approximations in the Hubbard model (2017 J. Phys.: Condens. Matter 29 425602). J. Phys.: Condens. Matter. 30, pp. 089501. 31/01/2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 13** Ion Mitxelena; Mario Piris. Analytic second-order energy derivatives in natural orbital functional theory. J. Math. Chem. 56 - 5, pp. 1445 - 1455. 23/01/2018.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: Sí
- 14** Ion Mitxelena; Mario Piris; Mauricio Rodríguez Mayorga. On the performance of Natural Orbital Functional Approximations in Hubbard Model. J. Phys. Cond. Matter. <http://iopscience.iop.org/10.1088/1361-648X/aa80ca>, 24/07/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 15** ION MITXELENA; MARIO PIRIS. Analytic gradients for Natural Orbital Functional Theory. The Journal of Chemical Physics. 146 - 014102, 02/01/2017.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No
- 16** Ion Mitxelena; Mario Piris. Molecular Electric Moments Calculated By Using Natural Orbital Functional Theory. The Journal of Chemical Physics. 25/05/2016.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Autor de correspondencia: No



- 17** ION MITXELENA; MARIO PIRIS; JESUS UGALDE. Advances in Approximate Natural Orbital Functional Theory, in State of The Art of Molecular Electronic Structure Computations: Correlation Methods, Basis Sets and More, edited by Philip Hoggan and Ugo Ancarani. 79, Adv. Quantum Chem., 13/05/2019.

Tipo de producción: Capítulo de libro

Tipo de soporte: Libro

- 18** Mario Piris; Ion Mitxelena. DoNOF: an open-source implementation of natural-orbital-functional-based methods for quantum chemistry. 13/04/2020.

Tipo de producción: Quantum chemistry software

Autor de correspondencia: No

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Towards a Global Natural Orbital Functional

Nombre del congreso: International Conference on Reduced Density Matrix Theory for Quantum Many-Fermion Systems (RDM2022)

Ciudad de celebración: Donostia - San Sebastián, País Vasco, España

Fecha de celebración: 15/06/2022

Fecha de finalización: 17/06/2022

Entidad organizadora: Donostia International Physics Center

Tipo de entidad: Centro de Investigación

Ion Mitxelena Echeverria.

- 2** **Título del trabajo:** A Functional for Strong Correlation in 1D & 2D

Nombre del congreso: Total Energy and Force Methods (MiniTotalEnergy2020)

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Donostia - San Sebastian, País Vasco, España

Fecha de celebración: 08/01/2020

Fecha de finalización: 10/01/2020

Entidad organizadora: Donostia International Physics Center

Tipo de entidad: Research center

Ion Mitxelena. "A Functional for Strong Correlation in 1D & 2D".

- 3** **Título del trabajo:** A Functional for Strong Correlation in 1D & 2D

Nombre del congreso: Trends in Nanotechnology International Conference (TNT2019)

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Donostia - San Sebastian, España

Fecha de celebración: 30/09/2019

Entidad organizadora: Donostia International Physics Center

Tipo de entidad: Research center

Ion Mitxelena.

- 4** **Título del trabajo:** NOF Theory: An alternative to DFT

Nombre del congreso: 18th International Conference on Density-Functional Theory and Its Applications

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Alicante, España

Fecha de celebración: 22/07/2019

Ion Mitxelena.

- 5** **Título del trabajo:** Multiplet calculation of strongly correlated electrons

Nombre del congreso: 2nd International Vigo Meeting on Advances Computational Chemistry

Autor de correspondencia: Sí



Fecha de celebración: 06/06/2019

Ciudad entidad organizadora: Vigo, España

Ion Mitxelena.

6 Título del trabajo: Natural Orbital Functional Theory from the N-representability perspective

Nombre del congreso: Transborder Theoretical Chemistry Days

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Bayonne, Francia

Fecha de celebración: 11/11/2018

Ion Mitxelena.

7 Título del trabajo: Natural Orbital Functional Theory

Ciudad de celebración: Havana, Cuba

Fecha de celebración: 12/07/2018

Entidad organizadora: Laboratorio de Química Computacional y Teórica

8 Título del trabajo: On the performance of NOFT on Strongly Correlated Systems

Nombre del congreso: 16th ICQC: Strong correlation in electronic structure theory

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Strasbourg, Francia

Fecha de celebración: 24/06/2018

Ion Mitxelena.

9 Título del trabajo: Recent advances in NOFT

Nombre del congreso: New Challenges in Reduced Density Matrix Functional Theory

Ciudad de celebración: Lausanne, Suiza

Fecha de celebración: 27/09/2017

Ion Mitxelena.

10 Título del trabajo: Analytic derivative methods for Natural Orbital Functional Theory

Nombre del congreso: 1st International Vigo Meeting on Advanced Computational Chemistry

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Vigo, España

Fecha de celebración: 01/06/2017

Fecha de finalización: 02/06/2017

Ion Mitxelena.

11 Título del trabajo: Analytic gradients for natural orbital functional theory

Nombre del congreso: Transborder Theoretical Chemistry Days

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Bayonne, Francia

Fecha de celebración: 09/11/2016

Fecha de finalización: 10/11/2016

Ion Mitxelena.

12 Título del trabajo: Molecular Electric Moments Calculated By Using Natural Orbital Functional Theory

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

Autor de correspondencia: Sí

Ciudad de celebración: Castellón de la Plana, Comunidad Valenciana, España

Fecha de celebración: 27/06/2016

Ion Mitxelena.



Otros méritos

Estancias en centros públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Vrije Universiteit **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Department of Theoretical Chemistry
Ciudad entidad realización: Amsterdam, Holanda
Fecha de inicio-fin: 11/09/2019 - 22/09/2019 **Duración:** 12 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
- 2** **Entidad de realización:** Florida State University **Tipo de entidad:** Universidad
Facultad, instituto, centro: Department of Biology and Chemistry
Ciudad entidad realización: Tallahassee, Estados Unidos de América
Fecha de inicio-fin: 01/10/2017 - 31/12/2017 **Duración:** 3 meses
Objetivos de la estancia: Invitado/a

Ayudas y becas obtenidas

- 1** **Nombre de la ayuda:** Ayuda de contratación de Doctores recientes hasta su integración en programas de formación postdoctoral, referencia DOCREC20/47
Finalidad: Posdoctoral
Entidad concesionaria: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 01/04/2021
Fecha de finalización: 31/03/2022
Entidad de realización: Facultad de Química
- 2** **Nombre de la ayuda:** Ayuda de Formación de Personal Investigador de la UPV/EHU
Finalidad: Predoctoral
Entidad concesionaria: Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad
Fecha de concesión: 01/03/2016
Fecha de finalización: 29/02/2020
Entidad de realización: Universidad del País Vasco
Facultad, instituto, centro: Facultad de Química
- 3** **Nombre de la ayuda:** Beca de colaboración
Finalidad: Investigación
Entidad concesionaria: MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA
Fecha de concesión: 28/10/2014
Fecha de finalización: 30/06/2015
Entidad de realización: Donostia International Physics Center



Acreditaciones/reconocimientos obtenidos

- 1** **Descripción:** Profesor Contratado Doctor
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación
Fecha del reconocimiento: 24/05/2023

Tipo de entidad: Organismo

- 2** **Descripción:** Profesor Ayudante Doctor
Entidad acreditante: Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación
Fecha del reconocimiento: 30/04/2021

Tipo de entidad: Organismo