

ACRÓNIMO:	LOGO:
NOMBRE DEL GRUPO DE INVESTIGACIÓN MODELIZADO Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL	
Contacto en la Facultad de Farmacia (Nombre, email): Amaia Saracibar, amaia.saracibar@ehu.eus	
Enlace página web:	
Área(s) de la ciencia: Almacenamiento energético, Química computacional	

Palabras Clave:	Baterías de litio, Baterías de sodio, Teoría del Funcional de la Densidad, Mecánica estadística asistida por clusters
Descripción (800 caracteres)	
<p>Su investigación se centra en la predicción de propiedades electroquímicas haciendo uso métodos computacionales por primeros principios: las transformaciones estructurales durante el proceso de carga y descarga de la batería, así como la simulación de la curva voltaje composición son dos de los procesos relevantes descritos con las simulaciones DFT. Colabora, desde su incorporación como profesora en la Universidad, con el centro de investigación Cic-energigune.</p>	
Líneas de Investigación (800 caracteres máximo)	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Cálculos por primeros principios para entender las transformaciones estructurales en el proceso de intercalación de litio y otros metales en los materiales electrodo. 2. Mecánica estadística asistida por clusters para la predicción de comportamiento de materiales electrodo durante el proceso de carga y descarga. 	
Equipamiento	

Componentes del grupo		Departamento	Centro	Sección
IP	(Nombre y apellidos)			
CoIP				
Otros (especificar)				

(añadir tantas filas como componentes del grupo)

Foto del grupo de investigación (insertar en la tabla edo mandar por correo electrónico junto a la ficha)
--