

<b>AKRONIMOA:</b>	<b>LOGOA:</b>
<b>IKERKETA TALDEAREN IZENNA</b> <b>MODELIZAZIOA ETA SIMULAZIO KONPUTAZIONALA</b>	
<b>Kontaktua Farmazia Fakultatean (Izena, posta elektronikoa):</b>	
<b>Web orrirako esteka:</b>	
<b>Zientziaren esparrua(k): Biltegitratze energetikoa, kimika konputazionala</b>	

<b>Hitz gakoak:</b>	<b>Litio bateriak, sodio bateriak, , Dentsitate Funtzionalaren Teoria, Klusters-bidezko mekanika estadistikoa</b>
<b>Deskribapena (gehienez 800 karaktere)</b> Bere ikerketa, propietate elektrokimikoen iragarpenean zentratzen da, metodo konputazionalak erabilia DFT eta kulster-retan mekanika estadistikoaan oinarrituta , bateriaren karga- eta deskarga-prozesuko egiturazko eraldaketak aurreikustea da helburua. Halaber tensio- konposizioaren kurbaren iragarpena eta interkalazio prozesuan parte hartzen duen fase desberdinen erlazioa. Unibertsitatean irakasle hasi zenetik, Cic-energigune ikerketa-zentroarekin kolaboratzen du.	
<b>Ikerketa-lerroak (gehienez 800 karaktere)</b>  1. Material elektrodoetan litioa eta beste metal batzuk tartekatzeko prozesuaren egiturazko eraldaketak ulertzeko lehen printzipioetan oinarritutako kalkuluak. 2. Klusterretan ionnarraturako mekanika estatistikoa, karga- eta deskarga-prozesuan portaera aurreikusteko elektrodo materialetan.	
<b>Ekipamendua</b>	

Ikerketa taldekideak		Saila	Zentrua	Sail Atala
<b>Ikertzaile Nagusia (IN)</b>	<b>(Izen Abizenak)</b>			
<b>IN-laguna</b>				
<b>Besteak (zehaztu)</b>				

(gehitu taldekide adina lerro)

<b>Ikerketa taldearen argazkia</b> (taulan txertatu edo fitxarekin batera posta elektronikoz bidali)
--