

<b>AKRONIMOA:</b> TheoChem	<b>LOGOA:</b>
<b>IKERKETA TALDEAREN IZENA</b>	
<b>Kimika Teorikoa</b>	
<b>Kontaktua Farmazia Fakultatean (Izena, posta elektronikoa):</b> Elena Formoso, <a href="mailto:elena.formoso@ehu.es">elena.formoso@ehu.es</a>	
<b>Web orrirako esteka:</b> <a href="http://www.ehu.es/chemistry/theory/">http://www.ehu.es/chemistry/theory/</a>	
<b>Zientziaren esparrua(k):</b> Kimika Fisikoa	

<b>Hitz gakoak:</b>	Quantum, MD, DFT, Ionic-Liquids, materials, nanotechnology, methods
<b>Deskribapena (gehienez 800 karaktere)</b>	
<p>Kimika Teoriko Taldea 28 ikertzaile eta 19 PhD ikasle baino gehiagok osatzen duten talde anitza da. Sede nagusia Kimika Fakultatean du, naiz eta ikerlariak Fakultate eta Ikerketa zentro desberdinetakoak izan (Kimika Fakultatea, Farmazia Fakultatea, Donostia International Physics Centre, Materialen Fisika Zentroa, Polymat ...)</p> <p>Kimika Teoriko Taldearen barruan hainbat talde txikiago aurkitzen dira, hala nola BioKimika Teorikoa Lab (BioKT lab), Inorganic Photochemistry Lab (IPL) eta Quantum Chemistry Development Group.</p> <p>Era zabal batean taldearen lana ikuspegi kimiko fisikoa erabiliz hainbat esparru desberdin ikertzea da: biokimika, kimika bioezorganikoa, fotokimika, polimeroak, likido-ionikoak ...</p>	
<b>Research lines (maximum 800 characters)</b>	
<p>1: Biophysical Chemistry: BioKT Lab group <a href="https://sites.google.com/view/biokt/home">https://sites.google.com/view/biokt/home</a></p> <p>Quantum mechanics of protein-ligand interactions, Simulations of protein conformational transitions, Kinetic models of metastable states, Pharmacological activity and drug design</p> <p>2: (Bio)nanotechnology:</p> <p>Upconverting materials, Metallic and semiconducting nanoparticles</p> <p>Inorganic Photochemistry Lab (IPL) <a href="https://lucasalassa.wixsite.com/salassa">https://lucasalassa.wixsite.com/salassa</a></p> <p>3: Method Development:</p> <p>Natural Orbital Functional Theory</p> <p>Quantum Chemistry Development Group <a href="https://quantchemdev.github.io/index.html">https://quantchemdev.github.io/index.html</a></p> <p>4: Noncovalent interactions:</p> <p>5: Coulomb Explosions:</p>	
<b>Ekipamendua</b>	

Ikerketa taldekideak		Saila	Zentrua	Sail Atala
<b>Ikertzaile Nagusia</b>	Xabier Lopez	<b>Polimero eta Material Aurreratuak:</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	



		<b>Fisika, Kimika eta Teknologia</b>		
<b>Irakasle Katedraduna</b>	<b>Jesus M. Ugalde Uribe-Etxebarria</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Professor</b>	<b>Mario Piris</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Professor</b>	<b>Luca Salassa</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Professor</b>	<b>Slawomir Grabowski</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Professor</b>	<b>Andreas Heidenreich</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Associate</b>	<b>David Casanova</b>		<b>Donostia International Physics Centre</b>	
<b>Ikerbasque Research Associate</b>	<b>Eduard Matito</b>		<b>Donostia International Physics Centre</b>	
<b>Ikerbasque Research Associate</b>	<b>Daniel Reta</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikerbasque Research Associate</b>	<b>Carlos Sánchez</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Irakasle Agregatua</b>	<b>Elena Formoso</b>	<b>Kimika Fisika</b>	<b>Farmazia Fakultatea</b>	
<b>Irakasle Agregatua</b>	<b>Jose M. (Txema) Mercero</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Irakasle Titularra</b>	<b>Elixabete Rezabal</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Irakasle Atxikia</b>	<b>Elisa Jimenez-Izal</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak:</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	



		<b>Fisika, Kimika eta Teknologia</b>		
<b>Irakasle Atxikia</b>	<b>Fernando Ruipérez</b>	<b>Kimika Fisika</b>	<b>Farmazia Fakultatea</b>	
<b>Irakasle Atxikia</b>	<b>Jon Zubeltzu</b>	<b>Fisika Aplikatua I</b>	<b>Ingenieritza Eskola</b>	
<b>Irakaslea</b>	<b>Ion Mitxelena</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ikertzaile Iraunkorra</b>	<b>Jon M. (Txoni) Matxain</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Ramón et Cajal Ikertzailea</b>	<b>David de Sancho</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Juan de la Cierva Ikertzailea</b>	<b>Eloy Ramos</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Roberto Álvarez</b>		<b>Donostia International Physics Centre</b>	
<b>Ikertzailea</b>	<b>Abel Carreras</b>		<b>Materials Physics Center</b>	
<b>Ikertzailea</b>	<b>Claire Tonnelé</b>		<b>Donostia International Physics Centre</b>	
<b>Juan de la Cierva Ikertzailea</b>	<b>Mesías Orozco</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Rubén R. Ferrerás</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Luis Antonio Soriano</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Mireia Vidal</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Alejandro Rivero</b>			
<b>Ikertzailea</b>	<b>Jon Zubelzu</b>	<b>Polimero eta Material Aurreratuak: Fisika, Kimika eta Teknologia</b>	<b>Kimika Fakultatea</b>	
<b>Visiting Research Professor</b>	<b>Gernot Frenking</b>			

(gehitu taldekide adina lerro)

**Ikerketa taldearen argazkia** (taulan txertatu edo fitxarekin batera posta elektronikoz bidali)