



Scheda Candidato 21 – Computational Chemistry / Drug Discovery

Profilo sintetico

Ricercatore post-doc in chimica farmaceutica e computazionale con esperienza in drug design, modellistica molecolare, QSAR e chimoinformatica. Competenza avanzata in docking, dinamica molecolare e metodi in silico per la predizione di attività biologiche e impatti ambientali. Forte attitudine analitica e orientamento alla ricerca applicata.

Competenze chiave

- Tecniche computazionali: docking, molecular dynamics (GROMACS, Maestro, GOLD), QM/MM (Gaussian09, CPMD, MiMiC), modelling e homology modelling.
- Chemoinformatics & QSAR: RDKit, OPERA, VolSurf+, DataWarrior, EPI Suite.
- Sperimentale: espressione e purificazione proteica, cromatografia LC/GC-MS, NMR, spettrofotometria.
- Programmazione: Python (numpy, scipy, scikit-learn, pandas, matplotlib), KNIME.
- Soft skills: scientific writing, mentoring, public speaking, teamwork.

Esperienze selezionate

Assegnista di ricerca post-doc – Università di Torino (2025)

Riposizionamento farmaci tramite approcci in silico; sviluppo QSAR per biodegradabilità e bioaccumulo; design di radiotraccianti PET per mutazione IDH1.

Borsista di ricerca post-laurea – Università di Torino (2021)

Identificazione in silico di target virali per molecole naturali contro HSV e SARS-CoV-2; supporto formazione studenti.

Stagista tesi magistrale – Gem ForLab s.r.l. (2020)

Espressione/purificazione proteica; test enzimatici su inibitori DHODH.

Formazione

PhD in Scienze Farmaceutiche e Biomolecolari – Università di Torino (2022–2024)

Laurea magistrale in Chimica (110L) – Università di Torino (2018–2021)

Laurea triennale in Chimica e Tecnologie Chimiche (110L) – Università di Torino (2015–2018)

Pubblicazioni selezionate

- Metodi avanzati per toxicity prediction – WIREs Computational Mol. Science (in press, 2025).
- Dual GSK3 β /HDAC inhibitors per Alzheimer – Eur. J. Med. Chem. (2025).
- Interazioni PFAS con trasportatori umani – Archives of Toxicology (2024).



- Beta-lactamase inhibitor optimization – Pharmaceuticals (2023).

Altre esperienze e collaborazioni

- Docking e MD su metalloproteine presso Forschungszentrum Jülich (2023–2024).
- Sviluppo modelli QSAR per Molecular Discovery Ltd (2023).
- Partecipazione e presentazioni orali in conferenze internazionali (EuroQSAR, SPRINT-AIDD, ecc.).