



Scheda Candidato 10 – Computational Chemistry / Electrocatalysis

Profilo sintetico

Ricercatrice con PhD in Chimica (Università di Barcellona), specializzata in catalisi elettrochimica, DFT, modellazione computazionale e studio di meccanismi di reazione per cicli C–N–O. Esperienza internazionale, con contributi a Nature Catalysis e ACS Catalysis. Attiva anche nella didattica universitaria.

Competenze chiave

- DFT/TD-DFT, modellazione catalizzatori, superfici e interfacce
- Studio meccanismi elettrocatalitici (OER, NO_x, acetilene, epossidi)
- Software avanzati: VASP, ASE, CRYSTAL (avanzato); ORCA, Gaussian (base)
- Python, Bash (base); elaborazione immagini (Gimp, Blender)
- Labo teaching: sintesi inorganica, computational chemistry

Esperienze selezionate

Scholarship Researcher – Università di Torino (2025–oggi)

Ricerca su catalisi computazionale e materiali elettrocatalitici.

Post-doc Researcher – Università di Barcellona (2025)

Materiali elettrocatalitici e modellazione computazionale.

PhD in Chemistry – Università di Barcellona (2021–2025)

Catalisi elettrochimica e simulazioni DFT sui cicli C–N–O.

Predocctoral Fellow – Università di Barcellona (2021)

Ricerca computazionale avanzata su catalizzatori.

Formazione

PhD in Chemistry (cum laude) – Università di Barcellona (2025)

LM in Chimica – Università di Torino (2020)

LT in Chimica – Università di Torino (2017)

Lingue

- Italiano: madrelingua
- Inglese: fluente
- Spagnolo: avanzato
- Catalano: base
- Francese: base



Pubblicazioni selezionate

- ACS Catalysis (2025): hydroxyl adsorption models
- Nature Catalysis (2024): elettro-riduzione acetilene a 1,3-butadiene
- J. Phys. Chem. C (2023): adsorbate–solvent interactions
- ACS Appl. Mater. Interfaces (2023): NO electroreduction
- Chemical Science (2023): OER catalysts

Attività didattiche

- Assistant professor laboratori sintesi inorganica e computational chemistry (Torino/Barcellona)
- Tutor MSSC Schools – Imperial College London