



Scheda Candidato 26 – Computational & Physical Chemistry / Energy Materials

Profilo sintetico

Ricercatrice con PhD in Chimica Fisica e dei Materiali, specializzata in modellistica computazionale (DFT, solid-state simulations), interfacce elettrodo–elettrolita, catalisi per la produzione di idrogeno, termoelettrici, supercapacitori e batterie allo stato solido. Esperienza in collaborazioni internazionali, sviluppo software (CRYSTALClear) e partecipazione a progetti europei e PRIN.

Competenze chiave

- Simulazioni di materia: VASP, CRYSTAL, ORCA, Gaussian, LAMMPS
- DFT, modellistica catalitica e studio difetti in materiali
- Interfacce elettrodo–elettrolita, termoelettrici, half-Heusler
- Solid-state batteries, ionic liquids per supercapacitori
- HPC, ambiente Linux, Python base per workflow computazionali
- Sviluppo software: contributo al package CRYSTALClear

Esperienze rilevanti

Postdoctoral Researcher – Material Science – Università di Torino (2024–oggi)

Caratterizzazione computazionale delle interfacce elettrodo–elettrolita.

PhD in Chemical and Materials Sciences – Università di Torino (2021–2024)

Modellazione DFT di pattern moiré in FeO/Au.

Visiting PhD Student – Sorbonne University – Paris (2023)

DFT su catalisi e ruolo dei metalli di transizione.

Researcher – PRIN MUSE & Horizon Europe EMPHASIS – Università di Torino (2023–oggi)

Catalizzatori per water-splitting e liquidi ionici per supercapacitori.

Formazione

PhD in Chemical and Materials Sciences – Università di Torino (2024)

MSc in Chemistry – Università di Torino (2021)

BSc in Chemistry – Università di Torino (2019)

Pubblicazioni selezionate

- Atomic-scale view of water chemistry on FeOx films – Nano Letters (2024)
- DFT study of FeO/Au moiré pattern – PCCP (2024)
- LiIn-modified anodes – PCCP (2024)
- Ni defects & Sb doping – Materials (2024)
- CRYSTALpytools – CPC (2023)
- Defect engineering in MoS₂ – J. Phys. Chem. C (2025)