



Chiara Corapi

Data di nascita: 11/08/1999 | **Nazionalità:** Italiana | **Sesso:** Femminile | **Numero di telefono:** (+39) 3203186968 (Cellulare) | **Indirizzo e-mail:** chiara_corapi@yahoo.it | **Indirizzo:** Via Piemonte 51, 88100, Catanzaro, Italia (Abitazione)

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

01/05/2024 – ATTUALE

ASSEGNO DI RICERCA Univeristà di Bologna

Campo di studio Chimica Fisica, Fotochimica

01/09/2021 – 26/01/2024 Pisa, Italia

LAUREA MAGISTRALE IN CHIMICA LM-54 - CURRICULM CHIMICO-FISICO Università di Pisa

Campo di studio Chimica Fisica | **Voto finale** 110 con lode |

Tesi Simulazione della dinamica di intersystem crossing del benzofenone a seguito di eccitazione nella banda $\pi\pi^*$. Relatore: Prof. Giovanni Granucci

01/09/2018 – 28/07/2021 Rende (Cs), Italia

LAUREA TRIENNALE IN CHIMICA E TECNOLOGIE CHIMICHE L-27 Unical - Università della Calabria

Campo di studio Chimica | **Voto finale** 110 con lode |

Tesi "Chiral Symmetry Breaking" e origine della vita: semplice trattazione e simulazione di un modello matematico che descrive l'evoluzione di un sistema racemico verso l'omochiralità. Relatore: Prof. Giorgio Celebre

COMPETENZE TECNICHE

Competenze in ambito Chimico

Laureata in Scienze Chimiche con ottima preparazione nel campo della Chimica-Fisica teorica maturata durante i tirocini formativi di laurea triennale e magistrale.

In grado di apprendere velocemente, fare lavoro di squadra ed eseguire le mansioni assegnate con precisione e proattività.

- Buona conoscenza e praticità con l'analisi matematica e l'algebra lineare.
- Buone competenze nell'ambito della Chimica Quantistica e Modellistica Molecolare:
 1. Metodi *ab initio*: Metodo Hartree-Fock, *Configuration Interaction* (CI), MCSCF, Metodo *Coupled Cluster*.
 2. Teoria del Funzionale della Densità.
 3. Metodi semi-empirici: Metodo MNDO, AM1.
- Buone competenze nell'ambito della Fotochimica teorica, in particolare nell'utilizzo di strumenti computazionali per la simulazione della dinamica di stato eccitato di molecole organiche.
- Esperienza nell'utilizzo di Gnuplot per la creazione di grafici e la rappresentazione accurata di dati sperimentali e computazionali.
- Esperienza nella programmazione in Fortran.
- Buone conoscenza dei principi fondamentali della Termodinamica Statistica.
- Buona conoscenza delle principali tecniche spettroscopiche (IR, NMR, NMR a stato solido, UV-Vis, Raman, spettroscopia di fluorescenza, spettroscopia Mossbauer, spettroscopia fotoelettronica).

FORMAZIONE E TIROCINI

14/03/2023 – 14/01/2024

Tirocinio curricolare presso il dipartimento di Chimica e Chimica Industriale dell'Università di Pisa (LM-54)

Il lavoro di tirocinio è stato incentrato sulla simulazione computazionale della dinamica di stato eccitato del benzofenone, a seguito di eccitazione nella banda $\pi\pi^*$. Ciò è stato effettuato utilizzando il metodo *Surface Hopping*, basato su funzioni d'onda elettroniche di tipo semi-empirico. Dato che il decadimento via *intersystem crossing* è importante nel benzofenone, è stato necessario includere l'accoppiamento spin-orbita nelle simulazioni di dinamica nonadiabatica. È stato inoltre simulato lo spettro di fotoionizzazione transiente del benzofenone, per il quale esistono in letteratura dati sperimentali. Il confronto con i dati sperimentali ha avuto il duplice scopo di validare la tecnica (in particolare riguardo l'algoritmo di decoerenza quantistica da usare nelle simulazioni) e di fornire indicazioni concernenti il meccanismo di decadimento del benzofenone.

20/04/2021 – 30/06/2021

Tirocinio curricolare presso dipartimento di Chimica e Tecnologie Chimiche dell'Università della Calabria (L-27)

Durante il tirocinio curricolare è stato elaborato un semplice modello matematico, basato su una intuizione originariamente suggerita da F.C. Frank, in cui gli enantiomeri D ed L sottostanno ad un meccanismo autocatalitico che promuove l'emergere delle differenze rispetto al racemo e, alla fine, l'assoluta prevalenza di una specie rispetto all'altra.

L'approccio utilizzato per interpretare il fenomeno di *Chiral Symmetry Breaking* non è, strettamente parlando, né di tipo stocastico, né di tipo prettamente deterministico, intendendo per quest'ultimo un'interpretazione basata sullo studio di equazioni cinetiche.

Il modello sviluppato si basa, infatti, su un approccio "deterministico molecolare", attraverso il quale è stato riprodotto l'andamento degli enantiomeri D ed L nel tempo, confrontabile con quello risultante dalla risoluzione delle equazioni deterministiche e dalle simulazioni stocastiche.

04/2018

Corso di Approfondimento in Matematica (21 ore), Dipartimento di Matematica e Informatica, Università della Calabria

01/02/2017 – 24/04/2017

Corso di formazione: sicurezza per lavoratori " Formazione specifica rischio basso", Main Consulting S.r.l., Consorzio Ferrara Innovazione

Formazione specifica - Rischio Basso (4 ore): Identificazione dei rischi: rischi per la sicurezza e per la salute; Rischi specifici: rischi elettrici, rischi chimici, polveri, rumore, movimentazione manuale dei carichi; Videoterminali, postazione di lavoro ed ergonomia, macchine, attrezzature, microclima ed illuminazione; Organizzazione del lavoro, ambienti di lavoro, stress lavoro correlato, mobbing e burnout; Segnaletica di sicurezza; Gestione emergenze: procedure esodo incendi, procedure organizzative per il primo soccorso, procedure sicurezza; Rischi infortuni: generalità; Analisi dei tipici incidenti ed infortuni mancati.

COMPETENZE LINGUISTICHE

Lingua madre: **ITALIANO**

Altre lingue:

	COMPRENSIONE		ESPRESSIONE ORALE		SCRITTURA
	Ascolto	Lettura	Produzione orale	Interazione orale	
INGLESE	B2	B2	B2	B2	B2

Livelli: A1 e A2: Livello elementare B1 e B2: Livello intermedio C1 e C2: Livello avanzato

COMPETENZE DIGITALI

Gestione autonoma della posta e-mail | Basics of Fortran 92 | Basics of C++ | Bash scripting from terminal | Vi/ Vim | Social Network | Elaborazione testi: Microsoft Word, LaTeX | Buona conoscenza di Gnuplot, software per la realizzazione e rappresentazione di grafici e dati

ONORIFICENZE E RICONOSCIMENTI

2023

Borsa di studio – Università di Pisa

2022

Borsa di studio – Università di Pisa

2021

Borsa di Studio – Università della Calabria

2020

Borsa di studio – Università della Calabria

2019

Borsa di studio – Università della Calabria

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali presenti nel CV ai sensi dell'art. 13 d. lgs. 30 giugno 2003 n. 196 - "Codice in materia di protezione dei dati personali" e dell'art. 13 GDPR 679/16 - "Regolamento europeo sulla protezione dei dati personali".