

Curriculum Vitæ

Silvia Maria Casassa



Via P. Giuria 5, 10125 Torino  +39 339 47 97 077  silvia.casassa@unito.it

Informazioni Generali	3
DATI PERSONALI	3
CARRIERA ACCADEMICA	3
ISTRUZIONE E FORMAZIONE	4
SOMMARIO DELLA PRODUZIONE	4
ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE	5
COMPITI ISTITUZIONALI	5
SCUOLE DI SPECIALIZZAZIONE	5
COMPETENZE INFORMATICHE	6
LINGUE	6
Attività di ricerca	7
INTRODUZIONE	7
SVILUPPO DI SOFTWARE	7
APPLICAZIONI	9
PROGETTAZIONE, DIREZIONE E COORDINAZIONE DI GRUPPI DI RICERCA E/O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI	10
PROGETTI PER RISORSE DI CALCOLO	13
CONTRIBUTI A CONGRESSI ED ALTRI EVENTI SCIENTIFICI	14
ORGANIZZAZIONE DI EVENTI SCIENTIFICI	16
ATTIVITÀ COME VALUTATRICE DI PROGETTI E REFEREE	17
Publicazioni Scientifiche	18
INTRODUZIONE	18
ELENCO COMPLETO	18
Attività didattica	28
ATTIVITÀ DIDATTICA ISTITUZIONALE	28
ATTIVITÀ DIDATTICA INTERNAZIONALE	32
ATTIVITÀ DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI	34

Informazioni Generali

1.1 DATI PERSONALI

Nome	Silvia Maria Casassa
Nazionalità	Italiana
Nata	il 14 Febbraio 1970 a Torino
Codice Fiscale	CSSSVM70B54L2190
Affiliazioni	Dipartimento di Chimica Centro Interdipartimentale NIS Università degli Studi di Torino
Researcher Unique Identifiers	<ul style="list-style-type: none">o ORCID 0000-0003-0217-4920o ResearchID: H-2756-2016o Scopus Author ID: 6602265340o Google scholar: https://goo.gl/S3ryS7
Indirizzo	Via P. Giuria 5, 10125 Torino
📞Cellulare	+39 339 47 97 077
☎Telefono	+39 011 6707829
📠Fax	+39 011 6707855
✉E-Mail	silvia.casassa@unito.it

1.2 CARRIERA ACCADEMICA

- 2004–today **Ricercatrice Universitaria a tempo indeterminato**, presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Torino.
- 1999–2003 **Funzionario Tecnico, VIII q.f.**, area tecnico-scientifica e socio sanitaria, concorso pubblico con assunzione a tempo indeterminato presso il Dipartimento di Chimica I.F.M. dell'Università di Torino.
- 1998 **Post Doctoral Research Assistant**, presso l'Université Pierre et Marie Curie, Institut des Sciences de la Terre, Parigi (Francia).
- 2009 **Congedo di maternità**, dal 10 Febbraio al 31 Luglio 2009, per un totale di 5 mesi e mezzo.

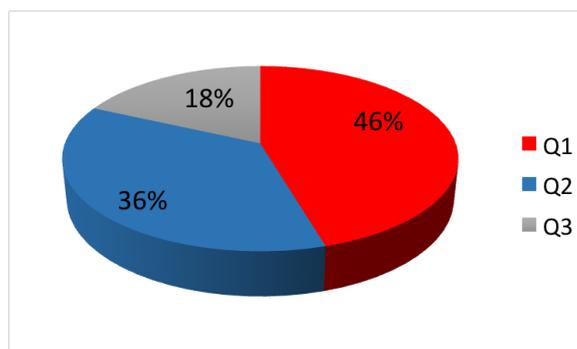
1.3 ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- 1997 **Dottorato in Scienze Chimiche.**
conseguito presso l'Università degli Studi di Torino
Supervisore: Prof. Cesare Pisani
Titolo: Caratterizzazione quanto-meccanica di difetti localizzati in cristalli.
Applicazione allo studio di reazioni alla superficie del ghiaccio.
- 1995 **Abilitazione alla Professione di Chimico**, superamento dell'esame di Stato e iscrizione all'Albo.
- 1994 **Borsa di specializzazione post-Laurea**, presso il Laboratoire de Spectrometrie et Dynamique Moléculaire, Université de Saint Jérôme, Marsiglia. Francia.
- 1993 **Laurea quinquennale in Chimica**, *ordinamento ante D.M. 509/99.*
conseguita presso l'Università degli Studi di Torino
Supervisore: Prof. Cesare Pisani
Voto finale: 110/110 e lode
Titolo: Uso completo della simmetria e generalizzazione termica nel metodo del cluster perturbato
- 1988 **Diploma di maturità Scientifica.**
conseguito presso il liceo Scientifico Statale Galileo Ferraris di Torino
Voto finale: 52/60

1.4 SOMMARIO DELLA PRODUZIONE

- Articoli in Rivista **64**, di cui 13 come prima autrice e 12 come corresponding author.
- Indicatori ISI WoS (Google Scholar) al 18/03/2019
- Bibliometrici
- ✓ Numero totale di citazioni 2471 (3165)
 - ✓ Average Citations per Items 39.22
 - ✓ h-index 23 (27)
 - ✓ i10-index (48)
 - ✓ IF medio 3.26

Classificazione dei prodotti della ricerca secondo i quartili JCR nelle categorie Physical Chemistry, Material Science, Nanoscience and Nanotechnology, Multidisciplinary Chemistry, Crystallography (fonte WoS).



1.5 ABILITAZIONE SCIENTIFICA NAZIONALE

Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) conseguita nel settore concorsuale **03/A2 MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE** alle funzioni di professore universitario di II Fascia (Bando 2012).

1.6 COMPITI ISTITUZIONALI

- ✓ **Membro** della Commissione Orientamento del Corso di Studi in SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI per l'a.a. 2018/2019.
- ✓ **Presidente** della Commissione Orientamento del Corso di Studi in SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI dal 2014 al 2018 (4 a.a.).
- ✓ **Membro** della Commissione per l'Orientamento, il Tutorato e il Job Placement della SCUOLA DI SCIENZE DELLA NATURA dal 2014 al 2018 (4 a.a.).
- ✓ **Segretaria** della Commissione del master ERASMUS MUNDUS in *Material Science Exploring Large Scale Facilities*, MAMASELF (www.mamaself.eu) dal 2007 al 2014 (7 a.a.) attivo presso la Laurea Magistrale in SCIENZA DEI MATERIALI.
- ✓ **Membro** della Commissione Orientamento del Corso di Studi triennale in SCIENZE DEI MATERIALI dal 2004 al 2007 (4 a.a.).
- ✓ **Membro** del Consiglio di Dipartimento di CHIMICA dal 2004 ad oggi (15 a.a.).

1.7 SCUOLE DI SPECIALIZZAZIONE

Durante il dottorato di ricerca e negli anni immediatamente successivi, SC ha partecipato ad alcune Scuole internazionali per approfondire e migliorare le proprie competenze informatiche e la propria formazione scientifica.

- 2010 **Introduction to Parallel Computing with MPI and OpenMP**, Bologna, Italia, Scuola organizzata dal CINECA, consorzio interuniversitario e maggior centro di calcolo italiano.

- 1999 **Introduzione al Sistema SGI Origin 2000**, *Bologna*, Italia, Scuola organizzata dal CINECA, consorzio interuniversitario e maggior centro di calcolo italiano.
- 1998 **NATO ASI School: Microscopic Properties and Processes in Minerals**, *Lucca*, Italia, Scuola organizzata dalla NATO Advance Study Institute (ASI).
- 1995 **Hartree-Fock Theory of the Electronic Structure of Solids**, *Torino*, Italia, HCM European Network School.
- 1994 **Metodi di elaborazione vettoriale e parallela**, *Bologna*, Italia, Scuola organizzata dal CINECA, consorzio interuniversitario e maggior centro di calcolo italiano.

1.8 COMPETENZE INFORMATICHE

Linguaggi di programmazione	Programmazione scientifica in Fortran90 e programmazione di base in <i>Python</i> . Utilizzo del <i>bash</i> e dell' <i>awk</i> per creazione di script e manipolazione dati.
Sistemi operativi	Competenze a livello di amministratore di sistema nella gestione dei sistemi operativi UNIX , Linux e MacOs . Conoscenze approfondite dei protocolli di rete (TCP/IP, <i>ssh</i> , <i>sftp</i>) e del linguaggio ipertestuale <i>html</i> . Buona capacità di lavoro con il sistema operativo Windows.
Software	Utilizzo degli applicativi di Office (Word, PowerPoint, Excel) e di software grafici open-source.

Tra il 2014 e il 2016, [SC](#) entra a far parte della [GARR](#), la rete italiana di computer per il calcolo parallelo, coordinata dal Prof. Antonio Laganà, in qualità di [referente](#) per il programma di calcolo CRYSTAL. Si veda a questo proposito il suo intervento al primo Workshop italiano sulla Grid, a Roma, nel 2014 (Sezione "CONTRIBUTI A CONGRESSI").

1.9 LINGUE

Italiano	Madrelingua
Inglese	Buona capacità di lettura, scrittura ed espressione orale.
Francese	Buona capacità di espressione orale e di lettura.
Spagnolo	Discreta capacità di lettura e comprensione di testi.

Attività di ricerca

2.1 INTRODUZIONE

L'attività di ricerca di [Silvia Casassa \(SC\)](#) si svolge nel settore della Chimica Teorica applicata alla simulazione delle proprietà chimico-fisiche dei sistemi periodici. Nel suo lavoro sono da sempre presenti e ugualmente importanti due aspetti: (i) quello di [sviluppo e ottimizzazione di metodi e algoritmi all'interno di programmi](#) di calcolo scientifici e (ii) quello [applicativo-computazionale](#) che prevede l'utilizzo di tali software per indagare le proprietà della materia.

L'attività di ricerca suddivisa tra questi due filoni, viene presentata nelle due sezioni successive facendo riferimento, dove possibile, alle pubblicazioni scientifiche, che attestano, di volta in volta, il lavoro svolto e i risultati conseguiti (numeri in parentesi quadra).

(NOTA: la numerazione adottata è quella contenuta nel capitolo successivo "PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE" nel quale è riportato l'elenco completo delle pubblicazioni).

2.2 SVILUPPO DI SOFTWARE

[SC](#) è da sempre impegnata nello sviluppo di codici scientifici per lo studio *ab initio* quanto-meccanico (QM) delle proprietà elettroniche, strutturali e di risposta di materiali cristallini.

Tale attività implica lo studio di nuovi formalismi, la loro implementazione all'interno di un codice, una parte di verifica e ottimizzazione degli algoritmi, nonché una fase di test e di documentazione per gli utenti e gli altri sviluppatori.

Ad oggi, [SC](#) è [co-autrice](#) dei software pubblici riportati nel seguito di questo paragrafo, scritti in FORTRAN90, disponibili per piattaforme Unix, Linux e MacOSX, distribuiti con licenze diverse, in base alla natura profit o non-profit delle istituzioni acquirenti e utilizzati dalla comunità scientifica internazionale.

Per ciascun codice, si riporta una breve descrizione delle caratteristiche principali e un sommario dei contributi originali dati da [SC](#). A testimonianza del lavoro corale necessario per sviluppare, aggiornare e rendere utilizzabile da terzi un codice, si fa inoltre riferimento ai Manuali di documentazione per gli Utenti, di cui [SC](#) è co-autrice, disponibili sui rispettivi siti web e continuamente aggiornati.

CRYSTAL [www.crystal.unito.it] - Suite di programmi per lo studio QM della chimica-fisica dello stato solido attraverso la risoluzione dell'equazione di Schroedinger per sistemi periodici con condizioni al contorno cicliche di Born-von Karman e uno sviluppo degli orbitali cristallini in termini di funzioni Gaussiane localizzate sugli atomi. È in grado di trattare con la stessa precisione e all'interno dello stesso approccio computazionale sistemi di diversa dimensionalità quali molecole, polimeri, superfici, bulk ottenendo proprietà strutturali, elettroniche, vibrazionali, ottiche, etc. a livello monodeterminante con approcci Hartree-Fock, del funzionale della densità (DFT) e ibridi.

Contributi. SC ha programmato e aggiornato ad ogni release pubblica del codice le interfacce con i programmi EMBED [54], CRYSCOR e TOPOND [5]. Ha introdotto una procedura automatica per il calcolo dell'energia di correlazione in CRYSTAL che può essere sfruttata nell'ottimizzazione di geometria e nell'utilizzo dei doppi ibridi.

In collaborazione con Claudio M. Zicovich-Wilson ha lavorato: (i) sulle calcolo delle funzioni di Wannier e su una metodo per localizzare e simmetrizzare tali funzioni [43] e (ii) su una procedura iterativa originale per il calcolo delle cariche atomiche di Hirshfeld [10].

In collaborazione con R. Orlando e A. Erba ha parallelizzato la parte di codice che a partire dalla funzione d'onda calcola le proprietà one-electron [14].

Ha introdotto un algoritmo per la calibrazione delle costanti di Mössbauer nei solidi [12].

Con Ian Bush, ricercatore dell'Oxford e-Research Centre e co-autore di CRYSTAL, sta lavorando per estendere la logica e gli algoritmi del massive-parallel a tutte le proprietà che dipendono dagli autovalori e autovettori dell'equazione di Schrödinger.

Documentazione

R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N. M. Harrison, I. J. Bush, P. D'Arco, M. Llunell, M. Causà, Y. Noël, L. Maschio, A. Erba, M. Rerat and **S. Casassa**. *CRYSTAL17 User's Manual* (University of Torino, Torino, 2017).

TOPOND [www.crystal.unito.it/topond] - codice per l'analisi topologica della densità elettronica dei sistemi cristallini secondo la teoria di Bader.

Contributi. SC ha integrato il programma nel codice CRYSTAL e contemporaneamente ne ha effettuato l'aggiornamento al FORTRAN90, passando dall'utilizzo statico della memoria a quello dinamico. Ha inoltre introdotto nuove opzioni nell'integrazione dei bacini atomici e la possibilità di organizzare i risultati attraverso nuovi formati grafici [20].

Documentazione

C. Gatti and **S. Casassa**, *TOPOND14 User's Manual* (CNR-ISTM, 2013).

CRYSCOR [www.cryscor.unito.it] - codice per il calcolo dell'energia di correlazione in sistemi non conduttori, attraverso l'estensione del metodo perturbativo locale ai sistemi periodici.

Contributi. Implementazione delle equazione perturbative, introduzione di criteri per lo screening degli integrali [21], scrittura dell'interfaccia per il calcolo degli integrali bielettronici con utilizzo della simmetria puntuale per ridurre il numero di elementi da calcolare ([37], [40], [41], [45]). Sviluppo di un metodo originale per la correzione al primo ordine della matrice densità one-electron ([39], [42]). Gestione del codice per la distribuzione pubblica, ovvero ottimizzazione interfaccia utenti, test e documentazione.

Documentazione

C. Pisani, **S. Casassa**, L. Maschio, M. Schütz, D. Usvyat, A. Erba, M. Halo, S. Salustro, *CRYSCOR09 User's Manual* (University of Torino, Torino, 2009).

EMBED [www.theochem.unito.it/embed] - programma QM per lo studio di difetti localizzati nei cristalli attraverso il formalismo della funzione di Green. Il codice dal 2001 non è più supportato.

Contributi. Estensione del metodo del cluster perturbato ai sistemi metallici. Introduzione del potenziale chimico nel calcolo dell'energia ([60], [62], [63]).

Documentazione

C. Pisani, U. Birkenheuer, **S. Casassa** and F. Corà, *EMBED01 User's Manual* (University of Torino, Torino, 2001).

C. Pisani, U. Birkenheuer, F. Corà, R. Nada and **S. Casassa**, *EMBED96 User's Manual* (University of Torino, Torino, 1996).

2.3 APPLICAZIONI

Nel corso del suo lavoro di ricerca, **SC** ha applicato i metodi e gli strumenti di analisi della meccanica quantistica ad una serie di sistemi di interesse scientifico e tecnologico, spesso in collaborazione con gruppi sperimentali. Nel seguito, viene presentata una sintesi delle principali linee di ricerca, sottolineando le collaborazioni e indicando le pubblicazioni correlate.

- **Difetti puntuali localizzati.** Sfruttando le potenzialità del programma EMBED **SC** ha studiato gli effetti perturbativi prodotti da difetti puntuali in matrici cristalline perfette, con particolare attenzione all'eventuale manifestarsi di nuove proprietà ([49], [53], [56], [62]).

- **Chimica-fisica del ghiaccio.** Il ghiaccio, cristallo molecolare formato da legami idrogeno, costituisce un sistema di estremo interesse per le sue proprietà chimico-fisiche e la sua importanza in moltissimi fenomeni biologici, fisici, geologici e chimici.

SC ha affrontato lo studio del ghiaccio ordinario (stabile a basse pressioni) partendo dal **problema del modello** ovvero di come riprodurre un reticolo di molecole d'acqua periodico (e dunque simulabile con i programmi QM per lo stato solido) che però contenesse un certo disordine protonico a corto raggio, proprietà intrinseca e fondamentale del ghiaccio ordinario. Il modello, inoltre, doveva essere tale da consentire il "taglio" di superfici stabili e realistiche ([34], [44], [59], [61]).

Ottenuta una struttura stabile e realistica, è iniziato lo studio delle **proprietà strutturali, vibrazionali, elastiche e ottiche** del ghiaccio ([18], [33], [36]). Infine, è stato analizzato il **ruolo del ghiaccio in alcune reazioni** di interesse per la chimica ambientale ([52], [55], [58]) e per l'astrochimica [2].

- **Chimica delle superfici e delle interfacce.** Oltre alla superficie del ghiaccio, **SC** ha approfondito la caratterizzazione di interfacce metallo-ossidi ([46], [48], [50], [51]).

- **Ruolo della correlazione elettronica.** Utilizzando il codice CRYSCOR, **SC** ha studiato il ruolo della correlazione elettronica nei processi di fisisorzione ([17], [19], [25], [28]) nella formazione di cristalli molecolari, nella stabilità relativa tra fasi ([22], [24], [26], [27], [29], [32], [35], [38]) e sulle proprietà one-electron ([23], [30], [31]).

- Negli ultimi anni, SC ha condotto studi sulla stabilità termodinamica e sulla reattività chimica di diverse classi di materiali affiancando agli strumenti canonici quali l'analisi della struttura elettronica, il calcolo degli spettri vibrazionali, etc. l'utilizzo degli strumenti e degli indicatori propri dell'analisi [topologica della densità elettronica](#) secondo la teoria di Bader ([1], [3], [4], [6], [7], [8], [9], [13], [15], [16]).

2.4 PROGETTAZIONE, DIREZIONE E COORDINAZIONE DI GRUPPI DI RICERCA E/O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

In ambito Internazionale

SC ha partecipato ad attività di ricerca finanziate nell'ambito di [progetti internazionali](#) in qualità di [responsabile di unità](#) (RU) e di [membro di unità di ricerca](#) (MUR), come si evince dalla Tabella seguente, nella quale, per ciascun progetto, si è indicato l'argomento, la durata e il numero di pubblicazioni.

Anni	Progetto	Ruolo	mesi	Pub.
2014-16	COST Action MP1306 , Coordinatore Scientifico Prof. Hubert Ebert, <i>EUSpec, Modern Tools for Spectroscopy on Advanced Materials</i> (www.cost.eu/COST_Actions/mpns/MP1306)	RU	36	3
2001-03	Progetto Comunità Europea , Coordinatore Scientifico Prof. V. Sulimov, <i>Optical Devices Using Photosensitivity for their Elaboration, ODUPE</i> (www.odupe.dk)	MUR	36	4

SC ha [collaborato](#) negli anni con numerosi ricercatori appartenenti a Università straniere. Alcune di queste collaborazioni sono nate all'interno di progetti finanziati altre sono legate a temi scientifici che hanno richiesto l'apporto di diverse competenze e la partecipazione di più soggetti.

Le principali collaborazioni sono qui riportate seguendo un ordine temporale e riflettono, nella varietà dei temi e nell'eterogeneità delle persone, la capacità di SC di lavorare in gruppo, in vari contesti e in diversi ambiti scientifici. I numeri in parentesi quadra si riferiscono alle pubblicazioni maturate durante ciascuna di queste collaborazioni e il cui elenco completo è riportato nel capitolo successivo.

2018–today **Prof. J. Manuel Recio**, *Universidad de Oviedo*, Oviedo (Spagna), conosciuto durante l'edizione del 2018 della *Sagamore Conference*. L'idea è di mettere a punto un'interfaccia tra il codice CRYSTAL e il programma da lui sviluppato per il calcolo della pressione chimica nei sistemi cristallini. Con questo obiettivo SC partecipa al progetto *Mecanochemistry under Controlled Conditions of Pressure (MECANOCONTROL2)* per il quale il Prof. Recio ha chiesto supporto finanziario al Governo spagnolo per gli anni 2019/2021.

- 2017–today **Prof. Julia Contreras-Garcia**, *Université Pierre et Marie Curie - UPMC*, Parigi (Francia), interazione nata durante la [co-direzione di una Tesi di Laurea Magistrale Erasmus](#). Per poter continuare a lavora insieme sulla messa a punto e ottimizzazione della funzione di localizzazione elettronica in CRYSTAL è stato richiesto un finanziamento all'Università francese UPMC, per il 2019/2020, presentando il progetto *Improving Experiment-Theory Interplay: a method for estimating error bars in DFT (IETI)*.
- 2015–today **Prof. Julio Sambrano e Dr. Naiara Leticia Marana**, *Universidade Estadual Paulista - UNESP*, Bauru (Brasil), conosciuto durante l'edizione italiana del Chitel, tenutasi a Torino nel 2015. La collaborazione scientifica ha inizio con la [co-tutela di una Tesi di Dottorato internazionale](#) della studentessa Naiara Leticia Marana che trascorre 4 mesi presso il gruppo di Teorica. Il lavoro di ricerca, iniziato con lo studio delle proprietà vibrazionali, elastiche e topologiche dell'ossido di Zinco si allarga alla caratterizzazione di nanotubi *single* e *double-wall*. La Dr. Naiara Marana, dopo aver conseguito il PhD, ha continuato a lavorare con CRYSTAL ed è attualmente in attesa di una risposta da parte del Governo Brasiliano al quale ha presentato una domanda per una borsa di studio post-doc presso il Gruppo di Chimica Teorica e sotto la supervisione di [SC](#) (BEPE Scholarship Project, FAPESP Process: 2016/25500-4) ([3], [8], [9], [13]).
- 2013–today **Dr. Carlo Gatti**, *CNR - ISTM*, Milano (Italia), collaboratore storico del gruppo di Chimica Teorica e autore del codice TOPOND. [SC](#), dopo aver lavorato a stretto contatto con l'autore, ristruttura e ottimizza il codice che diventa parte del programma CRYSTAL. Parallelizza gli algoritmi esistenti ed introduce nuove funzioni. Dal 2014, segue il supporto agli utenti e l'aggiornamento della documentazione ([14], [65]).
- 2010–today **Prof. Nicholas Harrison e Dr. Giuseppe Mallia**, *Imperial College*, London (Great Britain), co-autore di CRYSTAL il primo e ricercatore presso l'Imperial College di Londra il secondo. Con loro, insieme al gruppo del Prof. M. Schütz, si lavora sull'applicazione della correlazione elettronica allo studio della reattività superficiale. Nel 2013 [SC](#) trascorre 3 mesi a Londra in qualità di visiting-professor e la collaborazione si estende anche all'organizzazione congiunta delle Scuole CRYSTAL londinesi, che culmina nella co-direzione della prossima edizione della MSSC2019 prevista per Settembre 2019 ([17], [19], [25], [28]).
- 2008-2016 **Prof. Claudio M. Zicovich-Wilson**, *Universidad Autonoma del Estado de Morelos*, Cuernavaca (Mexico), co-autore di CRYSTAL e amico. [SC](#) trascorre 5 mesi in Messico presso il suo gruppo di ricerca a lavorare sulle funzioni di Wannier. Vengono sviluppati insieme algoritmi originali che sfruttano la simmetria puntuale e la localizzazione di tali funzioni, con applicazioni specifiche nel codice CRYSCOR. Nell'ultimo anno di attività di CZV introducono in CRYSTAL le cariche di Hirshfeld, attraverso una estensione del metodo originale al caso dei sistemi periodici ([10], [20], [43]).

2005-2012 **Prof. Martin Schütz e Prof. Denis Usvyat**, *Universität Regensburg*, Regensburg (Germania), co-autori del codice CRYSCOR. Il progetto CRYSCOR, per il calcolo della correlazione elettronica nei solidi cristallini nasce nel 2002 da una idea e dal lavoro del Prof. Cesare Pisani. Nel 2004, il Prof. Pisani coinvolge nel progetto il Prof. Martin Schütz, esperto di correlazione elettronica in ambito molecolare. Dalla collaborazione tra i due gruppi di ricerca nasce il primo codice periodico *ab initio* in grado di calcolare, attraverso un metodo perturbativo, il contributo all'energia totale dovuto alla correlazione dinamica tra il moto degli elettroni ([21], [37], [40], [41], [45]).

In ambito Nazionale

SC ha partecipato e partecipa ad attività di ricerca finanziate nell'ambito di [progetti nazionali](#) ed è stata [responsabile di unità \(RU\)](#) [principal investigator \(PI\)](#) o [membro di unità di ricerca \(MUR\)](#) di diversi progetti. Per ciascun progetto, nella Tabella seguente, è indicata la durata in mesi, il ruolo di SC e il numero di pubblicazioni.

Anni	Progetto	Ruolo	mesi	Pub
2018-20	Ateneo-Compagnia di San Paolo , coordinatore scientifico Prof. Alberto Castellero, <i>Ab-initio and experiments for new thermoelectrics (CSTO162398)</i> . All'interno di questo progetto, SC ha partecipato con un intervento orale al Congresso <i>GiTe2019, Giornate sulla Termoelettricità</i> durante il quale ha presentato i nuovi algoritmi implementati nel codice CRYSTAL per il calcolo delle proprietà di trasporto nei solidi e risultati computazionali su due materiali termoelettrici particolarmente promettenti.	MUR	36	
2017-19	PRIN2015 , Coordinatore Scientifico Prof. Vincenzo Barone, <i>Simulation Tools for Astrochemical Reactivity and Spectroscopy in the Cyberinfrastructure for Astrochemical Organic Species, STARS in CAOS</i> . Grazie a questo progetto, è iniziata una collaborazione con la scienziata Cecilia Ceccarelli sulla spettroscopia e reattività di molecole organiche sul ghiaccio, negli spazi interstellari.	MUR	36	1

Anni	Progetto	Ruolo	mesi	Pub.
2013-15	PRIN2010 , Coordinatore Scientifico Prof. Maurizio Casarin, <i>Development of Energy-targeted Self-assembled supramolecular systems: a Convergent Approach through Resonant information Transfer between Experiments and Simulations, DESCARTES</i> . Questo progetto è stata l'opportunità per conoscere e lavorare con il Prof. Claudio Pettinari, dell'Università di Camerino e la Prof. Simona Galli, Università dell'Insubria, con i quali abbiamo presentato il PRIN2017, <i>MINION: Multiplexing Pyrazole and thiazole-based MIXMOFs as luminescent sensors for polluting ions in aqueous solutions</i> , che purtroppo non è stato finanziato.	PI	36	3
2012-14	Ateneo-Compagnia di San Paolo , Coordinatore Scientifico Prof. Gloria Berlier, <i>Development of oxidic and polymeric materials for stimuli responsive applications, OXIPOLYSTI</i> SC ha coordinato il settore del modeling svolgendo da supervisore della borsa post-doc della Dr. Migen Halo e collaborando strettamente con le colleghe sperimentali.	MUR	36	2
2007-09	PRIN2007 , Coordinatore Scientifico Prof. Carmelo Giacobazzo, <i>Metodi Computazionali avanzati per struttura e proprietà chimico fisiche dei cristalli</i>	MUR	24	4
2004-06	PRIN2004 , Coordinatore Scientifico Prof. Raffaele Resta, <i>Sviluppo di tecniche computazionali per lo studio delle proprietà di risposta ed elettroniche di materiali cristallini basate sull'uso di funzioni localizzate di Wannier</i> . All'interno di questo progetto è iniziata la collaborazione con il Prof. Claudio Zicovich, interrotta nel 2017 a causa della sua tragica scomparsa.	MUR	24	4

2.5 PROGETTI PER RISORSE DI CALCOLO

Come **Principal Investigator (PI)** SC ha vinto progetti per l'utilizzo di risorse di calcolo al CINECA, Consorzio Interuniversitario italiano e maggior centro di calcolo in Italia. Tali risorse sono essenziali per realizzare progetti scientifici e attività di ricerca in campo teorico e computazionale. Segue l'elenco dei progetti finanziati, nei quali SC ha svolto il ruolo di PI e di coordinatrice del gruppo di ricerca e per i quali si indica il titolo, l'obiettivo, le risorse di calcolo ottenute e i collaboratori.

- 2015 IS CRA-C Project: *S3AMAS - Surface-Supported Supramolecular Architectures: Modelling of photochemical-Active Systems*. CODICE HP10CP7ETO, ORE 92.000, HOST Galileo, COLLABORATORI: Jacopo Baima, Giulia Mangione

- 2013 IS CRA-C Project: *ABINPCP - Ab initio simulation of Porous Coordination Polymers for gas storage applications* CODICE HP10C1M3W8, ORE 1.800.000, HOST Fermi, COLLABORATORI: Roberto Orlando, Mattero Ferrabone, Elisa Albanese
- 2012 IS CRA-C Project: *FPHC - First principle study of Hydrogen Clathrates*. CODICE HP10CON82R, ORE 275.000, HOST Fermi, COLLABORATORI: Alessandro Erba, Lorenzo Maschio
- 2011 IS CRA-B Project: *DIAISiO - Quantum Chemical treatment of Electron Correlation in the Solid State with the CRYSCOR program*. CODICE HP10BGUEON, ORE 750.000, HOST Fermi, COLLABORATORI: Raffaella Demichelis
- 2010 IS CRA-C Project: *TPC - Testing the Parallel version of CRYSCOR, a quantum-mechanical ab-initio code for electron correlations in solids*. CODICE HP10CNWQPB, ORE 40.000, HOST SP6, COLLABORATORI: Claudio Zicovich-Wilson, Alessandro Erba, Lorenzo Maschio
- 2010 IS CRA-C Project: *QCECSSC - Quantum Chemical treatment of Electron Correlation in the Solid State with the CRYSCOR program*. CODICE HP10C5J7E1, ORE 20.000, HOST SP6, COLLABORATORI: Lorenzo Maschio, Alessandro Erba

2.6 CONTRIBUTI A CONGRESSI ED ALTRI EVENTI SCIENTIFICI

SC ha partecipato a circa 30 Congressi e Workshop internazionali, con poster o contributi orali. Nel seguito è riportata la lista delle [20 conferenze](#) alle quali [SC ha partecipato in qualità di relatrice](#), inserendo i dati sull'evento e il titolo di ciascuna presentazione orale.

- 2019 **GiTe2019, Giornate sulla Termoelettricità**, Bologna, Italia, Titolo: *Thermoelectric properties of TiNiSn and TaCoSn half-Heusler alloys through ab initio calculation*.
- 2019 **MCC-UKCP-EPCC Workshop on ab initio periodic codes**, Daresbury, Inghilterra, Titolo: *Crystal17: a modern tool for the ab initio study of crystalline solids*. [Invited speaker](#).
- 2018 **Second European Symposium on Chemical Bonding**, Oviedo, Spagna, Titolo: *CO in the Icy Universe: varied chemical interactions investigated at the same level of accuracy*.
- 2018 **Sagamore XIX Conference 2018**, Halifax, Canada, Titolo: *Comprehensive electron density analysis of 1 to 3D systems fully integrated in the ab initio CRYSTAL code*. [Invited speaker](#).
- 2017 **XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression - Chitel 2017**, Parigi, Francia, Titolo: *CRYSTAL17, a code for dealing with huge systems and tiny effects*.

- 2015 **Energy, Materials and Nanotechnology Congress - ENM**, *Istanbul, Turchia*, Titolo: *Advanced electron density properties by ab initio calculations: a parallel implementation in the CRYSTAL code*. [Invited speaker](#).
- 2014 **Modern Tools for Spectroscopy on Advanced Materials - Cost Action MP1306**, *Leuven, Belgio*, Titolo: *The CRYSTAL code*. [Invited speaker](#).
- 2014 **1st Italian Grid Training Workshop per il calcolo su piattaforme distribuite - IGTW**, *Roma, Italia*, Titolo: *CRYSTAL14 a Program for the ab initio investigation of Crystalline Solids*. [Invited speaker](#).
- 2010 **International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry - IMAMPC**, *Madrid, Spagna*, Titolo: *CRYSCOR, a computational tool for the study of electronic correlation in crystals: features and applications*. [Invited speaker](#).
- 2008 **Workshop on Computational Chemistry - ICQC08**, *Berlino, Germania*, Titolo: *CRYSCOR, a local MP2 program for periodic systems: features, applications and perspectives*.
- 2007 **Workshop on Local Correlation Methods: from molecules to crystals**, *Dresden, Germania*, Titolo: *CRYSCOR: a post Hartree-Fock local-correlation code for CRYSTAL*. [Invited speaker](#).
- 2005 **European Conference of Computational Chemistry, EUCC5**, *La Londe Les Maures, Francia*, Titolo: *A local, periodic approach for the MP2 estimate of electron correlation energies in non conducting crystals*.
- 2003 **V Congresso Nazionale di Chimica Computazionale**, *Siena, Italia*, Titolo: *Approccio locale per il trattamento della Correlazione elettronica nei sistemi periodici non conduttori*.
- 2002 **Xth International Conference on the Physics and Chemistry of Ice**, *St. John's, Canada*, Titolo: *HOCl interacting with Chlorine Ice surface: an ab-initio quantum-mechanical perturbed-cluster approach*.
- 2001 **XIVth Conference-Workshop Horizon on Hydrogen Bond Research**, *Torino, Italia*, Titolo: *HOCl interacting with Chlorine Ice surface: the role of the substrate hydrogen bond network*.
- 2000 **Xth International Congress of Quantum Chemistry**, *Menton, Francia*, Titolo: *Embedded-cluster ab-initio study of the optical properties of oxygen deficient alpha quartz*.
- 2000 **Workshop on Chemical Bond**, *Colle-sur-Loup, Francia*, Titolo: *Local defects in crystalline systems and the topology of their electron density. The case of F⁻ and alpha center in LiF crystal*.
- 1997 **Congresso Nazionale La Chimica per L'ambiente**, *Ferrara, Italia*, Titolo: *Methods, results and perspectives of theoretical chemistry in enviromental problems*.

- 1995 **Modelling of Localized States in Condensed Matter**, Keele, Gran Bretagna, Titolo: *Proton-ordered ice: periodic models and embedded-cluster study of impurities*.
- 1996 **IXth International Conference on the Physics and Chemistry of Ice**, Hanover, USA, Titolo: *Quantum-mechanical study of proton-ordered ice structures, both perfect and with defects*.

2.7 ORGANIZZAZIONE DI EVENTI SCIENTIFICI

SC ha contribuito alla direzione e organizzazione di [eventi scientifici internazionali](#), dei quali si riporta l'elenco completo.

Direzione Scuole Internazionali

- ✓ **2019**, [Co-direttrice](#) della Scuola internazionale MSSC2019, Londra (GB), 16-20 Settembre (www.imperial.ac.uk/mssc2019).
- ✓ **2016**, [Direttrice](#) della Scuola internazionale MSSC2016, Torino (I), 4-9 Settembre (www.crystal.unito.it/mssc2016).

Comitati Scientifici

- ✓ **2013**, Membro del Comitato del Workshop internazionale in memoria del Prof. C. Pisani: *Solid State Quantum chemistry (WSSQC-13)*, Torino (I), 6-7 Settembre (www.theochem.unito.it/WSSQC-13).
- ✓ **2008**, Membro del Comitato del Workshop internazionale in onore del Prof. C. Pisani: *Ab initio simulation of crystalline solids: hystory and prospects*, Torino (I), 8-9 Settembre (www.theochem.unito.it/workshop08).
- ✓ **2004**, Membro del Comitato del Workshop internazionale: *Local correlation methods: from molecules to crystals*, Torino (I), 9-11 Settembre (www.theochem.unito.it/lcc2004).

Comitati Organizzatori

- ✓ **2018**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2018, Torino (I), 2-7 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2018).
- ✓ **2016**, Membro del Comitato della Scuola internazionale *Molecules at Surfaces*, Bardonecchia (I), 31 Gennaio-5 Febbraio (www.nis.unito.it/ispc2016).
- ✓ **2013**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2013, Torino (I), 1-5 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2013).
- ✓ **2011**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2011, Torino (I), 4-9 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2011).
- ✓ **2009**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2009, Torino (I), 6-11 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2009).
- ✓ **2007**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2007, Torino (I), 2-7 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2007).

Comitati
Organizzatori

- ✓ **2006**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2006, Torino (I), 3-8 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2006).
- ✓ **2003**, Membro del Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2003 Torino (I), 7-12 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2003).
- ✓ **2002**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2002, Torino (I), 8-13 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2002).
- ✓ **2001**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2001, Torino (I), 11-15 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2001).
- ✓ **2000**, Membro del Comitato della Scuola internazionale MSSC2000, Torino (I), 16-20 Settebre (www.crystal.unito.it/mssc2000).

2.8 ATTIVITÀ COME VALUTATRICE DI PROGETTI E REFEREE

SC svolge attività di [referee](#) in molte riviste internazionali che adottano la peer-review quale meccanismo di selezione degli articoli. In particolare, a partire dal 2011, ha collaborato con le seguenti riviste: PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, CHEMPHYSCHEM, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY, JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, CHEMCOMM, THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, VIBRATIONAL SPECTROSCOPY, valutando un totale di 42 manoscritti.

SC fa parte dei [valutatori del CINECA](#) per i Progetti ISCRA (*Italian SuperComputing Resource Allocation*) e dal 2017 ha valutato 2 domande ISCRA-B.

SC ha fatto parte dei [valutatori dei progetti nazionali](#) del Programma SIR 2014 del CINECA e, in qualità di revisore, ha valutato due Proposal.

Publicazioni Scientifiche

3.1 INTRODUZIONE

SC è autrice di 70 pubblicazioni scientifiche di cui 64 pubblicate su riviste soggette alla peer-review. In totale, i lavori pubblicati da SC hanno ricevuto più 2470 citazioni secondo ISI WoS (3165 Google Scholar).

Secondo il WoS, le pubblicazioni si collocano principalmente nelle categorie Chemistry (47%) Physics (40%) Material Science (17%) Science Technology (5%) e Crystallography (3%) come evidenziato in Figura 2.

In Figura 3 è riportata la distribuzione dei lavori scientifici nelle diverse riviste ISI. I dati sono stati elaborati dal Web of Science e sono aggiornati al 21/05/2019.



Figura 2. Distribuzione delle pubblicazioni per area di ricerca.



Figura 3. Distribuzione delle pubblicazioni secondo le categorie del Web of Science.

3.2 ELENCO COMPLETO

Di seguito, l'elenco completo delle pubblicazioni scientifiche per ognuna delle quali si riporta l'*impact factor* (IF) della rivista nell'anno di pubblicazione e il numero di citazioni (*Times Cited*, TC) aggiornate al 21/5/2019 come appaiono sul sito del Web of Science e su Google Scholar (in parentesi).

- 2019**
K. Abhishek, D. Naumenko, G. Rossi, E. Magnano, S. Nappini, F. Bondino, E. Segoloni, L. Amidani, F. D'Acapito, F. Boscherini, L. Barba, E. Pace, M. Benfatto, **S. Casassa**, M. Pedio,
Effect of long-range order on Intermolecular Interactions in Organic Semiconductors: Zinc octaethyl porphyrin molecular thin films model systems
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, accepted. IF=3.906.
- 2018**
L. Zamirri, **S. Casassa**, A. Rimola, M. Segado-Centellas, C. Ceccarelli and P. Ugliengo,
IR spectral fingerprint of carbon monoxide in interstellar water ice models
MONTHLY NOTICES OF THE ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY **480**, 1427-1444.
DOI: 10.1093/mnras/sty1927. IF=5.194, TC=1 (3).
- 2018**
N. L. Marana, **S. Casassa**, E. Longo, J. S. Sambrano,
Computational simulations of ZnO@GaN and GaN@ZnO core@shell nanotubes
JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY **226**, 217-225.
DOI: 10.1016/j.jssc.2018.07.023. IF=2.179, TC=0 (0).
- 2018**
J. Maul, I. dos Santos, J. R. Sambrano, **S. Casassa**, A. Erba
A quantum-mechanical investigation of Oxygen vacancy and copper doping in the orthorhombic CaSnO₃ perovskite
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **20**, 20970-20980.
DOI 10.1039/C8CP03481H. IF=3.906, TC=0 (0).
- 2018**
R. Dovesi, A. Erba, R. Orlando, C. M Zicovich-Wilson, B. Civalleri, L. Maschio, M. Rérat, **S. Casassa**, J. Baima, S. Salustro,
Quantum-mechanical condensed matter simulations with crystal
WILEY INTERDISCIPLINARY REVIEWS: COMPUTATIONAL MOLECULAR SCIENCE **8**, e1360.
DOI: 10.1002/wcms.1360. IF=8.836, TC=81 (109).
- 2017**
F. Musso, **S. Casassa**, M. Corno, P. Ugliengo,
How strong are H-bonds at the fully hydroxylated silica surfaces? Insights from the B3LYP electron density topological analysis
STRUCTURAL CHEMISTRY **28**, pp 1009-1015,
DOI 10.1007/s11224-016-0906-7. IF=2.019, TC=3 (7).
- 2017**
N. Mosca, R. Vismara, J.A. Fernandes, **S. Casassa**, K.V. Domasevitch, E. Bailó-García, F.J. Maldonado-Hó, C. Pettinari, S. Galli,
CH₃-Tagged Bis(pyrazolato)-Based Coordination Polymers and Metal-Organic Frameworks: An Experimental and Theoretical Insight
CRYSTAL GROWTH AND DESIGN **17**, pp 3854-3867,
DOI 10.1007/s11224-016-0906-7. IF=3.972, TC=4 (4).

8. **2017**
N.L. Marana, **S. Casassa**, J.R. Sambrano,
Adsorption of NH₃ with Different Coverages on Single-Walled ZnO Nanotube: DFT and QTAIM Study
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **121**, pp 8109-8119,
DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b10396. IF=4.484, TC=4 (5).
9. **2017**
N.L. Marana, **S. Casassa**, J.R. Sambrano,
Piezoelectric, elastic, Infrared and Raman behavior of ZnO wurtzite under pressure from periodic DFT calculations
CHEMICAL PHYSICS **485**, pp 98-107,
DOI: 10.1016/j.chemphys.2017.02.001. IF=1.707, TC=7 (6).
10. **2016**
C.M. Zicovich-Wilson, M.,Hô, A.M. Navarrete-López, **S. Casassa**,
Hirshfeld-I charges in linear combination of atomic orbitals periodic calculations
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **135**, pp 188,
DOI 10.1007/s00214-016-1942-5. IF=1.890, TC=7 (10).
11. **2016**
M. Halo, A.M. Ferrari, G. Berlier, I. Miletto, **S. Casassa**,
Experimental and first-principles IR characterization of quercetin adsorbed on a silica surface
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **135**, pp 123,
DOI 10.1007/s00214-016-1854-4. IF=1.890, TC=4 (4).
12. **2016**
S. Casassa, A.M. Ferrari,
Calibration of ⁵⁷Fe Mössbauer constants by first principles
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **18**, pp 10201-10206,
DOI: 10.1039/C5CP07882B. IF=4.123, TC=6 (5).
13. **2016**
N.L. Marana, **S. Casassa**, E. Longo, J.R. Sambrano,
Structural, Electronic, Vibrational, and Topological Analysis of Single-Walled Zinc Oxide Nanotubes
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **120**, pp 6814-6823,
DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b11905. IF=4.536, TC=10 (11).
14. **2015**
S. Casassa, A. Erba, J. Baima, R. Orlando,
Electron density analysis of large (molecular and periodic) systems: A parallel implementation
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY **36**, pp 1940-1946,
DOI: 10.1002/jcc.24033. IF=3.648, TC=13 (15).
15. **2015**
J. Baima, R. Macchieraldo, C. Pettinari, **S. Casassa**,
Ab initio investigation of the affinity of novel bipyrazolate-based MOFs towards H₂ and CO₂
CRYSTENGCOMM **17**, pp 448-455,
DOI: 10.1039/c4ce01989j. IF=3.849, TC=4 (4).

16. **2014**
E. Albanese, B. Civalleri, **S. Casassa** and M. Baricco,
Investigation on the Decomposition Enthalpy of Novel Mixed $Mg(1-x)Zn_x(BH_4)_2$ Borohydrides by Means of Periodic DFT Calculations
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **118**, pp 23468-23475,
DOI:10.1021/jp5048562. IF=4.772, TC=7 (7).
17. **2014**
R. Martinez-Casado, D. Usvyat, L. Maschio, G. Mallia, **S. Casassa**, J. Ellis, M. Schuetz and N. M. Harrison,
Diffraction of helium on $MgO(100)$ surface calculated from first-principles
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **16**, pp 21106–21113,
DOI: 10.1039/c4cp01145g. IF=4.493, TC=8 (9).
18. **2014**
S. Casassa, J. Baima, A. Mahmoud and B. Kirtman,
An initio investigation of electronic and vibrational contributions to linear and nonlinear dielectric properties of ice
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **140**, pp 224702-1:7,
DOI: 10.1063/1.4880961. IF=2.952, TC=3 (4).
19. **2014**
R. Martinez-Casado, D. Usvyat, L. Maschio, G. Mallia, **S. Casassa**, J. Ellis, M. Schuetz and N. M. Harrison,
Approaching an exact treatment of electronic correlations at solid surfaces: The binding energy of the lowest bound state of helium adsorbed on $MgO(100)$
PHYSICAL REVIEW B **89**, pp 205138,
DOI: 10.1103/PhysRevB.89.205138. IF=3.736. TC=11 (16).
20. **2014**
R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C. M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, **S. Casassa**, L. Maschio, M. Ferrabone, M. De la Pierre, P. D'Arco, Y. Noël, M. Causà, M. Rerat, and B. Kirtman,
CRYSTAL14: A Program for the Ab initio Investigation of Crystalline Solids
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY **114**, pp 1287-1317,
DOI: 10.1002/qua.24658. IF=1.432, TC=737 (953).
21. **2012**
C. Pisani, M. Schuetz, **S. Casassa**, D. Usvyat, L. Maschio, M. Lorenz, A. Erba,
Cryscor: a program for the post-Hartree-Fock treatment of periodic systems
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **14**, pp 7615-7628,
DOI: 10.1039/C2CP23927B. IF=3.829, TC=78 (125).
22. **2012**
S. Casassa, R. Demichelis,
Relative energy of Aluminium Hydroxides: the role of electron correlation
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C **116**, pp 13313-13321,
DOI: 10.1021/jp300419t. IF=4.814, TC=13 (15)
23. **2011**
A. Erba, M. Itou, Y. Sakurai, R. Yamaki, M. Ito, **S. Casassa**, L. Maschio, A. Terentjevs, C. Pisani,

Beyond a single-determinantal description of the density matrix of periodic systems: Experimental versus theoretical Compton profiles of crystalline Silicon

PHYSICAL REVIEW B **83**, pp 125208,

DOI: 10.1103/PhysRevB.83.125208. IF=3.691, TC=21 (24).

24. **2011**

A. Erba, L. Maschio, C. Pisani, **S. Casassa**,

Pressure-induced transitions in solid nitrogen: Role of dispersive interactions

PHYSICAL REVIEW B **84**, pp 012101,

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.012101. IF=3.691, TC=18 (22).

25. **2011**

R. Martinez-Casado, G. Mallia, D. Usvyat, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Schuetz, N. M. Harrison,
He-atom scattering from MgO(100): calculating diffraction peak intensities with a semi ab initio potential

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **13**, pp 14750-14757,

DOI: 10.1039/C1CP21212E. IF=3.573, TC=9 (12).

26. **2011**

M. Halo, **S. Casassa**, L. Maschio, C. Pisani, R. Dovesi, D. Ehinon, I. Baraille, M. Rerat, D. Usvyat,

Periodic ab initio estimates of the dispersive interaction between molecular nitrogen and a monolayer of hexagonal BN

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **13**, pp 4434,

DOI: 10.1039/C0CP01687J. IF=3.573, TC=14 (16).

27. **2011**

A. Erba, L. Maschio, S. Salustro, **S. Casassa**,

A post-HartreeFock study of pressure-induced phase transitions in solid nitrogen: The case of the α , γ and ϵ low-pressure phases

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **134**, pp 074502,

DOI: 10.1063/1.3553206. IF=3.333, TC=19 (21).

28. **2011**

R. Martinez-Casado, G. Mallia, D. Usvyat, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Schuetz, N. M. Harrison,
Periodic quantum mechanical simulation of the HeMgO(100) interaction potential

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **134**, pp 014706-1:9,

DOI: 10.1063/1.3517868. IF=3.333, TC=30 (37).

29. **2011**

M. Halo, C. Pisani, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Schuetz, D. Usvyat,

Electron correlation decides the stability of cubic versus hexagonal boron nitride

PHYSICAL REVIEW B **83**, p. 035117-1:8,

DOI: 10.1103/PhysRevB.83.035117. IF=3.691, TC=22 (25).

30. **2011**

C. Pisani, A. Erba, **S. Casassa**, M. Itou, Y. Sakurai,

Anisotropy of the electron momentum distribution in alpha-quartz investigated by Compton scattering and ab initio simulation

PHYSICAL REVIEW B **84**, p. 245102-1:12,

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.245102. IF=3.691, TC=16 (22).

31. **2010**
A. Erba, C. Pisani, **S. Casassa**, L. Maschio, M. Schuetz, D. Usvyat,
MP2 versus density-functional theory study of the Compton profiles of crystalline urea
PHYSICAL REVIEW B **81**, pp 165108-1:11,
DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165108. IF=3.774, TC=37 (45).
32. **2009**
M. Halo, **S. Casassa**, L. Maschio, C. Pisani,
Periodic local-MP2 computational study of crystalline neon
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS **11**, pp 586-592,
DOI: 10.1039/b812870g. IF=4.116, TC=13 (21).
33. **2009**
C. Pisani, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Halo, A. Erba,
A local-MP2 approach to the ab initio study of electron correlation in crystals and to the simulation of vibrational spectra: the case of Ice XI
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **123**, pp 327-335,
DOI: 10.1007/s00214-009-0512-5. IF=2.584, TC=10 (13).
34. **2009**
A. Erba, **S. Casassa**, L. Maschio, C. Pisani,
DFT and Local-MP2 Periodic Study of the Structure and Stability of Two Proton-Ordered Polymorphs of Ice
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **113**, pp 2347-2354,
DOI: 10.1021/jp809885e. IF=3.471, TC=30 (35).
35. **2009**
M. Halo, **S. Casassa**, L. Maschio, C. Pisani,
Local MP2 periodic study of rare-gas crystals
CHEMICAL PHYSICS LETTERS **467**, p. 294-298,
DOI: 10.1016/j.cplett.2008.11.043. IF=2.291, TC=21 (27).
36. **2009**
A. Erba, **S. Casassa**, R. Dovesi, L. Maschio, C. Pisani,
Periodic density functional theory and local-MP2 study of the librational modes of Ice XI
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **130**, pp 074505-1:9,
DOI: doi: 10.1063/1.3076921. IF=3.093, TC=30 (39).
37. **2008**
C. Pisani, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Halo, M. Schuetz, D. Usvyat,
Periodic Local MP2 Method for the Study of Electronic Correlation in Crystals: Theory and Preliminary Applications
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY **29**, pp 2113-2124,
DOI: 10.1002/jcc.20975. IF=3.390, TC=168 (217).
38. **2008**
S. Casassa, M. Halo, L. Maschio,
A local MP2 periodic study of crystalline Argon
JOURNAL OF PHYSICS.: CONFERENCE SERIE **117**, pp 012007-1:8,
DOI: 10.1088/1742-6596/117/1/012007. IF=1.701, TC=16 (22).

39. **2007**
S. Casassa, M. Halo, L. Maschio, C. Roetti, C. Pisani,
Beyond a Hartree-Fock description of crystalline solids: the case of lithium hydride
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **117**, pp 781-791,
DOI: 10.1007/s00214-006-0198-x. IF=2.537, TC=23 (36).
40. **2007**
L. Maschio, D. Usvyat, C. Pisani, F. Manby, **S. Casassa**, M. Schuetz,
Fast local-MP2 method with density-fitting for crystals. I. Theory and algorithms
PHYSICAL REVIEW B **76**, pp 075101-1:9,
DOI: 10.1103/PhysRevB.76.075101. IF=3.172, TC=108 (140).
41. **2007**
D. Usvyat, L. Maschio, F. Manby, M. Schuetz, **S. Casassa**, C. Pisani,
Fast local-MP2 method with density-fitting for crystals. II. Test calculations and application to the carbon dioxide crystal
PHYSICAL REVIEW B **76**, pp 075102-1:11,
DOI: 10.1103/PhysRevB.76.075102. IF=3.172, TC=70 (87).
42. **2006**
C. Pisani, **S. Casassa**, L. Maschio,
On the Prospective Use of the One-Electron Density Matrix as a test of the Quality of Post-Hartree-Fock Schemes for Crystals
ZEITSCHRIFT FÜR PHYSIKALISCHE CHEMIE **220**, pp 913-926,
DOI: 10.1524/zpch.2006.220.7.913. IF=1.132, TC=11 (14).
43. **2006**
S. Casassa, C. Zicovich-Wilson, C. Pisani,
Symmetry-adapted Localized Wannier Functions suitable for periodic local correlation methods
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **116**, pp 726-733,
DOI: 10.1007/s00214-006-0119-z. IF=2.446, TC=43 (71).
44. **2005**
S. Casassa, M. Calatayud, K. Doll, C. Pisani, C. Minot,
Proton ordered cubic and hexagonal periodic models of ordinary Ice
CHEMICAL PHYSICS LETTERS **409**, pp 110-117,
DOI: 10.1016/j.cplett.2005.04.068. IF=2.438, TC=42 (47).
45. **2005**
C. Pisani, M. Busso, G. Capecchi, **S. Casassa**, R. Dovesi, L. Maschio, C. Zicovich-Wilson, M. Schuetz,
Local-MP2 electron correlation method for non conducting crystal
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **122**, pp 094113-1:12,
DOI: doi.org/10.1063/1.1857479. IF=3.138, TC=133 (199).
46. **2005**
A. Ferrari, **S. Casassa**, C. Pisani,
Electronic structure and morphology of MgO sub-monolayers at the Ag(001) surface: an ab-initio model study
PHYSICAL REVIEW B **71**, pp 155404-155412,
DOI: 10.1103/PhysRevB.71.155404. IF=3.185, TC=32 (33).

47. **2005**
C. Pisani, G. Capecchi, **S. Casassa**, L. Maschio,
Computational aspects of a local-MP2 treatment of electron correlation in periodic systems: SiC vs BeS
MOLECULAR PHYSICS **51**, pp 105-112,
DOI: 10.1080/00268970500179784. IF=1.351, TC=6 (13).
48. **2005**
A. Ferrari, **S. Casassa**, C. Pisani, S. Altrieri, A. Rota, S. Valeri,
Polar and non polar domain borders in MgO ultrathin films on Ag(001)
SURFACE SCIENCE **588**, pp 160-166,
DOI: 10.1016/j.susc.2005.05.043. IF=1.780, TC=33 (42).
49. **2004**
C. Pisani, M. Busso, F. Lopez-Gejo, **S. Casassa**, L. Maschio,
Quasi-periodic ab-initio models in material science: the case of oxygen deficient centres in optical fibers
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS **111**, pp 246-254,
DOI: 10.1007/s00214-003-0540-5. IF=2.209, TC=2 (3).
50. **2003**
C. Lamberti, E. Groppo, C. Prestipino, **S. Casassa**, A. M. Ferrari, C. Pisani, C. Giovanardi, P. Luches, S. Valeri, F. Boscherini,
Oxide/metal interface distance epitaxial strain in the NiO/Ag(001) system
PHYSICAL REVIEW LETTERS **91**, pp 046101-1:4,
DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.046101. IF=7.035, TC=75 (90).
51. **2002**
S. Casassa, A. Ferrari, M. Busso, C. Pisani,
Structural magnetic and electronic properties of NiO monolayer epitaxially grown on the (001) Ag surface: an ab initio density functional study
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **106**, pp 12978-12985,
DOI: 10.1021/jp026450q. IF=3.611, TC=39 (47).
52. **2002**
S. Casassa and C. Pisani,
Interaction of HOCl with a chlorinated ice surface to produce molecular chlorine: an ab initio study
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **116**, pp 9856-9864,
DOI: 10.1063/1.1476006. IF=2.998, TC=13, (15).
53. **2002**
M. Busso, **S. Casassa**, C. Pisani, V. Sulimov,
Ab initio simulation of oxygen vacancy bistability in pure and Ge-doped alpha-quartz
MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING **10**, pp 21-33,
ISSN: 0020-7608. IF=1.130, TC=8 (10).
54. **2000**
C. Pisani, R. Dovesi, C. Roetti, M. Causà, R. Orlando, **S. Casassa**, V.R. Saunders,
CRYSTAL and EMBED, two computational tools for the ab-initio study of electronic properties of crystal

INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY **77**, pp 1032-1048,
ISSN: 0020-7608. IF=1.317, TC=35 (53).

55. **2000**
S. Casassa,
Ab-initio study of periodic ice surfaces containing HCl
CHEMICAL PHYSICS LETTERS **321**, pp 1-7,
DOI: 10.1016/S0009-2614(99)01227-0. IF=2.364, TC=12 (18).
56. **2000**
V. Sulimov, **S. Casassa**, C. Pisani, J. Garapon, B. Poumellec,
Embedded-cluster ab-initio study of the neutral oxygen vacancy in quartz and cristobalite
MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING **8**, pp 763-773,
DOI: 10.1088/0965-0393/8/5/309. IF=0.803, TC=20 (28).
57. **1999**
B. Civalleri, **S. Casassa**, E. Garrone, C. Pisani, P. Ugliengo,
Quantum Mechanical Ab Initio Characterization of a Simple Periodic Model of the Silica Surface
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B **103**, pp 2165-2171,
DOI: 10.1021/jp9829187. IF=3.265, TC=69 (81).
58. **1998**
G. Bussolin, **S. Casassa**, C. Pisani, P. Ugliengo,
Ab initio study of HCl and HF interaction with crystalline ice
THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **108**,
DOI: 10.1063/1.475340. IF=3.147, TC=67 (74).
59. **1997**
S. Casassa, P. Ugliengo, C. Pisani,
Proton-ordered models of ordinary ice for quantum-mechanical studies
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **106**, pp 8030-8040,
DOI: 10.1063/1.473813. IF=3.247, TC=58 (60).
60. **1997**
C. Pisani, **S. Casassa**,
Energy estimates for local chemical processes in condensed matter
MOLECULAR ENGINEERING **7**, pp 231-244,
ISSN: 0925-5125. IF=1.602, (TC=8).
61. **1996**
C. Pisani, **S. Casassa**, P. Ugliengo,
Proton-ordered ice structures at zero pressure. A quantum-mechanical investigation
CHEMICAL PHYSICS LETTERS **253**, pp 201-208,
DOI: 10.1016/0009-2614(96)00228-X. IF=2.441, TC=61 (71).
62. **1995**
S. Casassa, C. Pisani,
Atomic-hydrogen interaction with metallic lithium: An ab-initio embedded-cluster study
PHYSICAL REVIEW B **51**, pp 7805-7815,
ISSN: 0163-1829. IF=2.880, TC=20 (27).

63. **1994**
C. Pisani, **S. Casassa**, F. Corà,
Hartree-Fock Perturbed-Cluster Treatment of local defects in Solids. II. The energy dependent coupling matrices
COMPUTER PHYSICS COMMUNICATIONS **82**, pp 157-167,
ISSN: 0010-4655. IF=1.737, TC=13 (13).

Altre Pubblicazioni

Il numero di citazioni, TC, ove riportato, è ottenuto da Google Scholar.

64. **2017** - Manuale operativo per gli utenti
R. Dovesi, V. R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N. M. Harrison, I. J. Bush, P. D'Arco, M. Llunell, M. Causà, Y. Noël, L. Maschio, A. Erba, M. Rerat and **S. Casassa**. *CRYSTAL17 User's Manual*.
University of Torino, Torino (Italy).
65. **2013** - Manuale operativo per gli utenti
C. Gatti and **S. Casassa**,
Topond14 User's Manual.
CNR-ISTM of Milano, Milano (Italy). TC=55
66. **2010** - Contributo in volume
M. Schuetz, D. Usvyat, M. Lorenz, C. Pisani, L. Maschio, **S. Casassa**, M. Halo,
Density Fitting for correlated calculations in periodic systems
In: Frederick R. Manby. ACCURATE CONDENSED-PHASE QUANTUM CHEMISTRY, p. 29-55,
New York:CRC press - Taylor and Francis Group,
ISBN: 9781439808368. TC=42.
67. **2009** - Manuale operativo per gli utenti
C. Pisani, M. Schuetz, **S. Casassa**, L. Maschio, D. Usvyat, M. Halo, A. Erba, M. Lorenz,
CRYSCOR09 User's Manual.
University of Torino, Torino (Italy).
68. **2001** - Manuale operativo per gli utenti
C. Pisani, U. Birkenheuer, **S. Casassa**, F. Corà,
EMBED01 User's Manual.
University of Torino, Torino (Italy).
69. **1997** - Tesi di Dottorato
S. Casassa,
Caratterizzazione quanto-meccanica di difetti localizzati in cristalli. Applicazione allo studio di reazioni alla superficie del ghiaccio
Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, Università di Torino.
70. **1996** - Manuale operativo per gli utenti
C. Pisani, U. Birkenheuer, F. Corà, R. Nada, **S. Casassa**,
EMBED96 User's Manual. University of Torino, Torino (Italy). TC=34.

Attività didattica

4.1 ATTIVITÀ DIDATTICA ISTITUZIONALE

ESERCITATRICE

Durante l'A.A. **2003/04**, SC ha svolto attività didattica e di tutoraggio con la qualifica di ESERCITATRICE nelle allora lauree quinquennali in Chimica e Scienza dei Materiali:

Corso	Anno	CdS	N _{stud}	ore
Chimica Fisica E	III	CH	50	16 h
Termodinamica	II	SDM	40	30 h

TITOLARE DI INSEGNAMENTI

Dopo aver preso servizio come ricercatrice confermata, nel 2004, SC ha ottenuto la titolarità di una serie di corsi all'interno del settore Scientifico CHIM02, nei diversi ambiti della Chimica-Fisica, in vari Corso di Laurea, di primo livello e magistrali. In particolare, SC ha insegnato:

- nei **Corso di Laurea di primo livello** di CHIMICA (CH) CHIMICA INDUSTRIALE (CI) e SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI (STDm)
- nelle **Lauree Magistrali** di METODOLOGIE CHIMICHE AVANZATE (LMMCA), CHIMICA (LMC) SCIENZE DEI MATERIALI (LMSDM) BENI CULTURALI (LMBC).

Negli anni dal 2005 al 2009, SC ha avuto la titolarità del corso STRUMENTI INFORMATICI PER L'INSEGNAMENTO DELLE SCIENZE (16 h per 4 a.a.) presso la Scuola di Specializzazione per Insegnanti di Scuola Secondaria di Torino (SISS) per le classi di Concorso A013 e A060.

Il corso aveva l'obiettivo di fornire agli insegnanti delle scuole medie superiori strumenti di base per: (i) la comprensione della WORLD WIDE WEB (ii) l'utilizzo delle banche dati scientifiche (iii) la realizzazione di un progetto didattico autonomo, sotto forma di pagina web ipertestuale, attraverso l'utilizzo del linguaggio di programmazione HTML.

In questo contesto, SC ha fatto parte della Commissioni: per gli esami finali, nel 2008, e per le selezioni in entrata, nel 2007 e 2008.

Segue l'elenco completo dei corsi in cui SC ha svolto attività didattica e per i quali ha gestito i relativi appelli di esame, suddivisi per singoli anni accademici. Negli anni per i quali è stato calcolato, è riportato l'indice di soddisfazione medio sulla docenza dell'insegnamento in questione.

Gli acronimi usati in Tabella sono i seguenti: CDS: corso di Studi, VMD: valutazione media docenti. Il numero degli studenti, N_{stud}, è approssimato facendo riferimento al numero di iscritti e/o al numero di questionari di valutazione compilati, quando disponibili.

Complessivamente, SC ha svolto attività didattica istituzionale per **15 a.a.**, dall'a.a. 2004/5 all'a.a. 2018/19, per un totale di **1544 ore** e **157 CFU**.

A.A.	Corso	Anno	CdS	N _{stud}	ore	CFU	VMD
2018/19	Chimica Fisica I	I	STDM	70	60	7	
	Modellistica dei Solidi	II	LMC	6	40	4	
	Ch. Fisica dei Mat. con Lab.	III	STDM	30	24	2	
				≈ 100	124	13	
2017/18	Chimica Fisica I	I	STDM	50	60	7	86.3
	Modellistica dei Solidi	II	LMC	6	40	4	96.8
	Ch. Fisica dei Mat. con Lab.	III	STDM	25	24	2	92.8
				≈ 80	124	13	92
2016/17	Chimica Fisica I	I	STDM	60	60	7	79.4
	Modellistica dei Solidi	II	LMC	7	40	4	100
	Ch. Fisica dei Mat. con Lab.	III	STDM	20	24	2	79.0
				≈ 80	124	13	86
2015/16	Chimica Fisica I	I	STDM	100	60	7	93.0
	Modellistica dei Solidi	II	LMC	6	40	4	93.1
	Ch. Fisica dei Mat. con Lab.	III	STDM	40	24	2	87.3
				≈ 140	124	13	91
2014/15	Chimica Fisica I	I	STDM	120	60	7	86.0
	Modellistica dei Solidi	V	LMMCA	10	40	4	100
				≈ 120	100	11	93
2013/14	Chimica Fisica I	I	STDM	60	60	7	83.7
	Modellistica dei Solidi	II	LMMCA	6	40	4	100
				≈ 60	100	11	92
2012/13	Chimica Fisica I	I	STDM	50	60	7	
	Modellistica dei Solidi	II	LMMCA	6	40	4	
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	20	20	2	
				≈ 70	120	13	
2011/12	Chimica Fisica I con Lab.	I	STDM	50	24	2	
	Modellistica dei Solidi	II	LMMCA	8	40	4	
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	20	20	2	
				≈ 70	84	8	
2010/11	Termodinamica	II	STDM	40	30	3	
	Modellistica dei Solidi	V	LMMCA	10	40	4	
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	20	20	2	
				≈ 70	90	9	
2009/10	Termodinamica	II	STDM	40	30	3	
	Modellistica dei Solidi	V	LMMCA	10	40	4	
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	20	20	2	
				≈ 70	90	9	
	<i>Silvia Casassa</i>	•	<i>Curriculum Vitae</i>				

A.A.	Corso	Anno	CdS	N _{stud}	ore	CFU
2008/9	Chimica Fisica I per BC	I	LMBC	40	40	6
	Termodinamica	II	STDM	40	20	2
	Forze ed Interazioni nei Solidi	II	LSMCA	12	20	2
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	16	20	2
	Strumenti Informatici per In.		SISS	20	16	-
				≈ 100	116	12
2007/8	Chimica Fisica I per BC	I	LMBC	40	40	6
	Solidi difettivi e Superfici	II	LMMCA	20	20	2
	Seminario Teorico Modellistico	V	LMSDM	16	20	2
	Strumenti Informatici per In.		SISS	20	16	-
				≈ 80	96	10
2006/7	Cinetica ed Equilibrio Ch.	III	CI	10	40	4
	Chimica in Rete	I, II	CH	50	20	2
	Solidi difettivi e Superfici	II	LMMCA	20	20	2
	Strumenti Informatici per In.		SISS	20	16	-
				≈ 80	96	8
2005/6	Cinetica ed Equilibrio Ch.	III	CI	10	40	4
	Chimica in Rete	I, II	CH	50	20	2
	Solidi difettivi e Superfici	II	LMMCA	20	20	2
	Strumenti Informatici per In.		SISS	20	16	-
				≈ 80	96	8
2004/5	Cinetica ed Equilibrio Ch.	III	CI	10	40	4
	Chimica in Rete	I, II	CH	50	20	2
				≈ 40	60	6

CORSI ORIGINALI E MATERIALE DIDATTICO

Dal 2007 al 2013, SC ha integrato l'offerta didattica della laurea Magistrale in Scienze dei Materiali proponendo e svolgendo una serie di SEMINARI TEORICI-MODELLISTICI su argomenti di chimica teorica e computazionale. Ciascun seminario corrispondeva a 2 CFU (circa 20 ore di lezione) ed era suddiviso in un modulo di didattica frontale e in una parte di esercitazione al computer, condotte in aula informatica. Questi in sintesi gli argomenti trattati nei vari anni:

- 2011-2013 **Molecular Dynamics with Phyton**, introduzione alle equazioni di dinamica molecolare classica e *ab initio*; scrittura di un semplice programma di simulazione e visualizzazione in Phyton di una dinamica molecolare con potenziali di Lennard-Jones.
- 2010-2011 **Thermodynamic of surfaces with *ab initio* methods**, come stimare la stabilità di superfici in funzione di pressione e temperatura attraverso calcoli *ab initio* con il programma CRYSTAL, in collaborazione con la Prof. A. Ferrari.

- 2009-2010 **Ab initio estimates of the density matrix of crystalline systems**, tecniche di calcolo della matrice densità tenendo conto della correlazione elettronica; confronto tra i valori calcolati con il codice CRYSCOR e i dati misurati per le seguenti osservabili: densità elettronica, fattori di struttura dei raggi X e profili Compton.
- 2008-2009 **Modeling 3-dimensional systems with CRYSTAL**, introduzione all'utilizzo di un codice quanto-meccanico per lo studio delle proprietà chimico-fisiche dei materiali.
- 2007-2008 **Local perturbative approach for the study of electron correlation in periodic systems**, metodo perturbativo di Moller-Plesset nella sua formulazione locale ed estensione ai sistemi periodici attraverso l'analisi e l'utilizzo del programma CRYSCOR.

Tali seminari, rivolti a studenti del II anno di LMSDM, erano tenuti in [lingua inglese](#) poiché il Corso di Studi è partner italiano di un consorzio di Università europee (Rennes, Montpellier, Monaco) con le quali porta avanti un MASTER ERASMUS MUNDUS in *Material Science exploring large scale facilities* (MAMASELF, www.mamasef.eu).

Nella seguente Tabella è [riassunta l'attività didattica istituzionale](#) suddivisa per insegnamento:

		a.a.	h	h (tot)
Chimica Fisica I	dal 2012/13 al 2018/19	7	60	420
Modellistica dei Solidi	dal 2009/10 al 2018/19	10	40	400
Chimica Fisica dei Materiali con Lab.	dal 2015/16 al 2018/19	4	24	96
Seminario Teorico Modellistico	dal 2007/8 al 2012/13	6	20	120
Chimica Fisica I con Laboratorio	2011/12	1	24	24
Termodinamica	dal 2008/9 al 2010/11	3	30	80
Chimica Fisica I per Beni Culturali	2007/8 al 2008/9	2	40	80
Forze e Interazioni nei Solidi	2008/9	1	20	20
Solidi Difettivi e Superfici	dal 2005/6 al 2007/8	3	20	60
Cinetica ed Equilibrio Chimico	dal 2004/5 al 2006/7	3	40	120
Chimica in Rete	dal 2004/5 al 2006/7	3	20	60
Strumenti Inform. Insegnamento Scienze	dal 2005/6 al 2008/9	4	16	64

[Nel corso degli anni](#), per venire incontro alle esigenze di studenti e studentesse e migliorare l'offerta formativa, SC ha raccolto e organizzato parte del materiale didattico sotto forma di dispense disponibili sulla pagina personale dell'Università di Torino.

- o Appunti di Termodinamica per Scienze dei Materiali (85 pagine, ultimo aggiornamento nel 2018, per i corsi di CHIMICA FISICA I e TERMODINAMICA)
- o Notes on Molecular Dynamics (20 pagine, in inglese, ultimo aggiornamento 2014, per il corso di SEMINARIO TEORICO MODELLISTICO)
- o Introduzione alla Modellistica dei Solidi (46 pagine, ultimo aggiornamento nel 2018, per i corsi di MODELLISTICA DEI SOLIDI, SEMINARIO TEORICO MODELLISTICO)

- o Cinetica ed Equilibrio Chimico (53 pagine, ultimo aggiornamento nel 2010, per i corsi di CINETICA e di TERMODINAMICA)

4.2 ATTIVITÀ DIDATTICA INTERNAZIONALE

- Visiting Professor **London, Imperial College, (15/6-8/8/2013)**, Didattica di terzo livello per dottorandi e post-doc dell'Imperial College e dell'Univeristy College (UCL) di Londra. Corso originale dal titolo: *ELECTRON CORRELATION IN SOLIDS. FROM THEORY TO CODING THROUGH ALGORITHMS* strutturato in **20 ore** di lezione frontale sul trattamento *ab initio* della correlazione elettronica nei solidi e **16 ore** di tutoraggio in aula informatica per le esercitazioni pratiche al calcolatore.
- Visiting Professor **Cuernava (MX), Universidad Autonoma, (20/2-21/5/2004)**, Didattica di terzo livello ai dottorandi di Chimica e Fisica dell'Universidad Autonoma dello Stato di Morelos. Corso originale dal titolo: *Solid state physical chemistry: a computational approach*. **12 ore** di lezione frontale sulla fisica dello stato solido e su tecniche per la soluzione dell'equazione di Schrödinger per sistemi cristallini.
- Invited teacher **Edizioni internazionali della Scuola CRYSTAL, Ab initio Modeling in Solid State Chemistry School (MSSC)**, Si tratta di Scuole internazionali dedicate ai fondamenti teorici e all'utilizzo del programma CRYSTAL rivolte a ricercatori di tutto il mondo e organizzate da Università straniere. In tali Scuole, che accolgono in media 40 partecipanti, SC è impegnata in un certo numero di **lezioni frontali** e di **tutoraggio** pomeridiano, durante le esercitazioni in aula informatica. Segue elenco con il numero di ore di insegnamento il cui totale ammonata approssimativamente a **22 ore** di lezione frontale e **104 ore** di tutoraggio.
- 2018 **Londra (UK) 17-22 Settembre, MSSC2018**, **2 ore** di lezione frontali e **8 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2018).
- 2017 **Minneapolis, USA, 9-14 Luglio, Minnesota Workshop on Ab Initio Modeling in Solid State Chemistry with CRYSTAL 2017**, **2 ore** di lezione frontali e **16 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.crystal.unito.it/mw-mssc17).
- 2017 **Londra (UK) 18-22 Settembre, MSSC2017**, **2 ore** di lezione frontali e **8 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2017).
- 2016 **Londra (UK) 19-23 Settembre, MSSC2016**, **2 ore** di lezione frontali e **8 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2016).
- 2015 **Regensburg (Germania) 19-24 Luglio, International School on Ab initio Modelling of Solids 2015**, **2 ore** di lezione frontali e **8 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.crystal.unito.it/isams2015).
- 2015 **Londra (UK) 14-18 Settembre, MSSC2015**, **2 ore** di lezione frontali e **8 ore** di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2015).
- 2014 **Janhtzi (India) 8-12 Marzo, International Workshop on Modeling of Materials**. **4 ore** di lezione frontali e **16 ore** di tutoraggio in aula informatica.

- 2014 **Londra (UK) 15-19 Settembre**, *MSSC2014*, 2 ore di lezione frontali e 8 ore di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2014).
- 2012 **Londra (UK) 17-21 Settembre 2012**, *MSSC2012*, 2 ore di lezione frontali e 8 ore di tutoraggio in aula informatica. (www.imperial.ac.uk/mssc2012).
- 2011 **Londra (UK) 19-23 Settembre 2011**, *MSSC2011*, 2 ore di lezione frontali e 8 ore di tutoraggio in aula informatica (www.imperial.ac.uk/mssc2011).
- 2006 **Spokane (USA) 17-22 Settembre 2006**, Scuola: *Ab initio Simulation of Crystalline Systems*, *ASCS2006*, 2 ore di lezione frontali e 12 ore di tutoraggio in aula informatica. (www.crystal.unito.it/ascs2006).

Invited Teacher **Scuole internazionali di Chimica Computazionale:**

- o **Sidi-Bel Abbes, Algeria, 2001**, *Summer School on Multiscale Modeling* nella quale SC ha partecipato presentando gli aspetti teorici e computazionali del programma CRYSTAL, *Ab initio modeling with the CRYSTAL code*, con 4 ore di lezione frontale seguite da 8 ore di tutoraggio durante le esercitazioni in aula informatica sul codice, in lingua Francese.
- o **Perugia, Italia, 2000**, *Scuola Modellistica e Computazionale di Sistemi Complessi* nella quale SC ha fatto 2 ore di lezione frontale su *A quantum-mechanical approach to an environmental problem: the ozone depletion* seguite da 4 ore di tutoraggio durante le esercitazioni in aula informatica sul codice CRYSTAL.

- Teacher **Edizioni torinesi della Scuola internazionale CRYSTAL, *Ab initio Modeling in Solid State Chemistry School (MSSC)***, organizzate dal gruppo di Chimica Teorica dell'Università di Torino e rivolte a ricercatori provenienti da tutto il mondo interessati a conoscere e utilizzare CRYSTAL. In queste Scuole, SC è impegnata in un certo numero di lezioni frontali e di tutoraggio durante le esercitazioni pomeridiane in aula informatica. Di seguito sono elencate tutte le Scuole, con il numero di ore di insegnamento il cui totale ammonterà approssimativamente a 6 ore di lezione frontale e 116 ore di tutoraggio.
- 2016 **Torino (I) 4-9 Settembre**, *MSSC2016*, (www.crystal.unito.it/mssc2016). 2 ore di lezioni frontali e 8 ore di tutoraggio in aula informatica.
 - 2013 **Torino (I) 1-5 Settembre**, *MSSC2013*, (www.crystal.unito.it/mssc2013). 1 ora di lezione frontale e 12 ore di tutoraggio in aula informatica.
 - 2011 **Torino (I) 4-9 Settembre**, *MSSC2011*, (www.crystal.unito.it/mssc2011). 1 ora di lezione frontale e 12 ore di tutoraggio in aula informatica.
 - 2009 **Torino (I) 6-11 Settembre**, *MSSC2009*, (www.crystal.unito.it/mssc2009). 1 ora di lezione frontale e 12 ore di tutoraggio in aula informatica.
 - 2007 **Torino (I) 2-7 Settembre**, *MSSC2007*, (www.crystal.unito.it/mssc2007). 1 ora di lezione frontale e 12 ore di tutoraggio in aula informatica.
 - 2006 **Torino (I) 3-8 Settembre**, *MSSC2006*, (www.crystal.unito.it/mssc2006). 12 ore di tutoraggio in aula informatica.

- 2003 **Torino (I) 7-12 Settembre**, *MSSC2003*, (www.crystal.unito.it/mssc2003).
12 ore di tutoraggio in aula informatica.
- 2002 **Torino (I) 8-13 Settembre**, *MSSC2002*, (www.crystal.unito.it/mssc2002).
12 ore di tutoraggio in aula informatica.
- 2001 **Torino (I) 11-15 Settembre**, *MSSC2001*, (www.crystal.unito.it/mssc2001).
12 ore di tutoraggio in aula informatica.
- 2000 **Torino (I) 16-20 Settembre**, *MSSC2000*, (www.crystal.unito.it/mssc2000).
12 ore di tutoraggio in aula informatica.

4.3 ATTIVITÀ DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI

Supervisione di tesisti, PhD, post-Doc

SC è stata responsabile dell'attività di ricerca di 3 studenti di Dottorato e referente scientifico per un assegno di ricerca post-doc.

- 2012-2015 Jacopo Baima, XXVIII ciclo di Dottorato dell'Università di Torino in Scienze Chimiche e dei Materiali, *Quantum mechanical ab initio study of complex materials: methods and applications*, in co-tutela con il Prof. Roberto Orlando.
- 2012 Migen Halo, Assegno di ricerca della durata di 12 mesi, *Studio delle proprietà ottiche di nanomateriali mediante calcoli quanto-meccanici*, all'interno del progetto OXIPOLYSTI, Ateneo-Compagnia di San Paolo.
- 2011-2014 Agnes Mahmoud, XXVII ciclo di Dottorato dell'Università di Torino in Scienze Chimiche e dei Materiali, *Application of New Algorithms of the CRYSTAL program to the Quantum-Chemical study of Elastic, Photoelastic, Dielectric and Piezoelectric Properties of Crystals*.
- 2009-2011 Alessandro Erba, XXIV ciclo di Dottorato in Scienza e Alta Tecnologia, *Development and Application of Quantum Mechanical Techniques for the Study of Electron Correlation Effects in Crystalline Materials. Symmetrized Wannier Functions and Density Matrix-related Properties*.

Supervisione di Tesi di Laurea Magistrale

SC è stata relatrice di 7 Tesi di Laurea Magistrale.

- 2019 Paolo Negro, Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali, *Massive parallel version of transport properties in CRYSTAL: application to Half-Heusler alloys*.
- 2019 Andrea Spinnicchia, Laurea Magistrale in Chimica *Molecular dynamics in CRYSTAL*.
- 2018 Linda Goletto, Laurea Magistrale in Chimica, *The Electron Localization Function in solid systems: implementing and testing algorithms* in co-tutela con la Prof. Julia Contreras-Garcia.

- 2014 Roberto Macchieraldo, Laurea Magistrale in Metodologie Chimiche Avanzate, *Ab initio characterization of 3,3',5,5'-Tetra-methyl-4,4'-bipyrazole based Metal Organic Framework.*
- 2012 Luana Lambiase, Laurea Magistrale in Metodologie Chimiche Avanzate, *Studio ab initio Quanto-Meccanico dei clatrati idrati dell'idrogeno.*
- 2011 Maurizio Poletti, Laurea Magistrale in Metodologie Chimiche Avanzate, *Matrice densità nei Solidi Cristallini per il calcolo di Proprietà nello spazio dei Momenti. Il caso dell' α -quarzo.*
- 2011 Riccardo Ciaglia, Laurea Magistrale in Scienza dei Materiali, *CdTe: construction of a new ab initio derived classical potential.*

Supervisione di Tesi di Laurea

SC è stata relatrice di 8 Tesi di Laurea triennale.

- 2019 Sara Licheri, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Hypothesis on Formamide formation on stratospheric Ice surface.*
- 2018 Chiara Pastura, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Transport properties in Half-Heusler alloys by ab initio calculation.*
- 2018 Fabio Renis, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Pyrazole/Thiazole-Based Metal-Organic Frameworks for the Detection of Heavy Metal Ions in Water.*
- 2018 Elena Melis, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Zirconia come bio-materiale in campo dentale.*
- 2017 Luz Karito Medina Canales, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Methane Clathrate.*
- 2016 Paolo Negro, Laurea Triennale in Scienza e Tecnologia dei Materiali, *Oxygen diffusion in BSCCO-2212 superconductor by ab initio calculations.*
- 2011 Andrea Molino, laurea triennale in Chimica, *Studio ab initio della stabilità termodinamica dei clatrati del metano.*
- 2009 Simone Salustro, Laurea Triennale in Scienze dei Materiali, *Quantum Mechanical Ab initio Study of Crystalline Nitrogen.*

Commissioni Erasmus e attività di Orientamento e Job placement

SC è stata Segretaria nella Commissione dell'Erasmus Mundus *Material Science Exploring Large Scale Facilities* (MAMASELF, www.mamaself.eu) del Corso di Studi Magistrale in SCIENZA DEI MATERIALI dal 2007 al 2014 (7 a.a.). Tale incarico, che ha richiesto un impegno di circa 100 ore per anno accademico, prevedeva le seguenti funzioni:

- selezione degli studenti extra-europei per l'accesso al Master attraverso analisi dei CV (\approx 30 ore/a.a.);

- partecipazione agli incontri internazionali tra le Università partner del progetto: Rennes 1, Montpellier, Technische e Ludwig Maximilian Universität di Monaco; (≈ 30 ore/a.a.);
- tutoraggio degli studenti e orientamento per favorire l'inserimento didattico in UniTO (≈ 30 ore/a.a.);
- adeguamento dei piani carriera alle normative europee per il conseguimento della doppia laurea (≈ 20 ore/a.a.).

SC è stata [Presidente della Commissione Orientamento](#) del Corso di Studi in SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI per 4 anni, dal 2014 al 2018, con un impegno di circa **80 ore all'anno**. Durante questo periodo, oltre a coordinare la Commissione, ha svolto annualmente le seguenti attività:

- conferenze di divulgazione scientifica e orientamento presso Scuole Superiori di Torino;
- organizzazione dell'evento PORTE APERTE A CHIMICA rivolta a tutti gli studenti/esse delle Scuole Superiori (edizione autunnale e primaverile);
- organizzazione dell'evento PORTE APERTE A SCIENZE DEI MATERIALI rivolta a tutti gli studenti/esse delle Scuole Superiori (edizione primaverile);
- partecipazione alle Giornate di Orientamento, promosse dalla Commissione Orientamento dell'Università di Torino, rivolte a tutti gli studenti/esse delle Scuole Superiori.

Come presidente della Commissione Orientamento, SC è stata la responsabile di 4 borse borse di Studio art.76, specifiche per azioni di tutoraggio ed orientamento, vinte da: Laura Guasco (2014/2015), Davide Salusso (2015-2016), Paolo Negro (2017-2018), Chiara Pastura (2017-2018).

Ha portato avanti il progetto [ORIENTAMENTE](#) (portale di Orientamento e preparazione al TARM) dell'Università degli Studi di Torino per il quale è stata responsabile per tre anni di seguito, dal 2015 al 2018, di un borsista art. 76, il Dr. Matteo Signorile.

Commissioni di Valutazione

SC ha fatto parte di alcune commissioni per la valutazione di tesi di dottorato. In particolare:

- 2018 Membro della Giuria internazionale per la dissertazione di Phd di Andi Cuko, *Modelling Nano-Oxide Materials with Technological and Environmental Relevance: Silica, Titania and Titanosilicates*, Università di Barcellona e Sorbonne Université, Parigi
- 2017 Membro della Giuria internazionale per l'abilitazione a Maitre des Recherches di Frederic Labat, *DFT modeling of complex interfaces in energy-based devices: from sensitized cells to solid-oxide fuel cells*, Università Pierre et Marie Curie, Parigi.
- 2017 Membro della Commissione nazionale di valutazione dei PhD dell'Università di Padova, XXIX ciclo, Università di Padova.
- 2015 Valutatrice della tesi di dottorato di Michele Romeo, *Development and applications of DFT methodologies for the simulation of core spectra of molecules adsorbed on surface*, relatrice Prof. Giovanna Fronzoni, Università di Trieste.

- 2015 Valutatrice della tesi di dottorato di Kirill A. Lomachenko, *Local environment and electronic structure of catalytic active transition metal centers in nanoporous materials determined by X-ray adsorption and X-ray emission spectroscopy*, relatore Prof. Carlo Lamberti, Università di Torino.
- 2014 Valutatrice della tesi di dottorato di Massimo delle Piane, *Quantum Mechanical Simulation of Biomolecules at the Interface with Inorganic Oxides*, relatore Prof. Piero Ugliengo, Università di Torino.
- 2011 Valutatrice della tesi di dottorato di Lorenzo Mino, *Surface properties and reactivity of TiO₂ nanocrystals: a combined experimental and computational study*, relatrice Prof. Silvia Bordiga, Università di Torino.