

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 02/B2 - Fisica Teorica della Materia, settore scientifico-disciplinare FIS/03 - Fisica della Materia presso il Dipartimento di Fisica "Aldo Pontremoli", (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 51 del 28/06/2019) Codice concorso 4042

Riccardo Capelli

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	CAPELLI
NOME	RICCARDO
DATA DI NASCITA	19 NOVEMBRE 1987

Formazione

- Laurea triennale in Fisica (2011), Università degli Studi di Milano, 100/110
- Laurea magistrale in Fisica (2014), Università degli Studi di Milano 110/110
- Dottorato di Ricerca in Fisica, Astrofisica e Fisica Applicata (2017), Università degli Studi di Milano

Cronologia dell'attività di ricerca

- 04/2014-10/2014 - Assegnista di ricerca presso l'Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare del CNR (ICRM-CNR) nella sede di Milano, nel gruppo del Dott. Giorgio Colombo.
- 11/2014-11/2017 - Dottorando presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Milano, nel gruppo del Prof. Guido Tiana, co-supervisionato dal Dott. Giorgio Colombo (ICRM-CNR).
- 02/2017 - Short-term visit presso la SISSA di Trieste, nel gruppo del Prof. Alessandro Laio.
- 09/2017 - Short-term visit presso la University of North Carolina at Chapel Hill, nel gruppo del Prof. Nikolay Dokholyan.
- 04/2019 - ora - Ricercatore postdottorale presso il Forschungszentrum Jülich, Computational Biomedicine Section (INM-9/IAS-5), nel gruppo del Prof. Paolo Carloni.
- 04/2019 - ora - Visitatore frequente presso il Politecnico Federale di Zurigo (ETHZ)/Università della Svizzera Italiana (USI) di Lugano, nel gruppo del prof. Michele Parrinello.

Grant

- "HPC-aided design of drugs with improved kinetics of binding" - VSR-FZJ computing time grant on JURECA supercomputer - 2 Mcore-h (~ €) - Principal Investigator

Seminari

In totale ho dato 4 seminari su invito e 4 contributi a conferenze

1. "The Role of Surface Energetics in the Formation of Protein-Antibody Interactions" (contributo) - 2nd Workshop of the Complex System Group at UniMi, Università degli Studi di Milano, Milano (2015)
2. "Path-independent Free Energy Evaluation of Amino Acid Mutations" (contributo) - 2nd Workshop "Condensed Matter Highlights", Università degli Studi di Milano, Milano (2015)
3. "Biased Molecular Simulations of Non-Equilibrium Protein Dynamics" (seminario su invito) at ETHZ/USI, Lugano, Svizzera (2018)
4. "Biased Molecular Simulations of Non-Equilibrium Protein Dynamics" (seminario su invito) at Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germania (2018)
5. "Ligand Unbinding from the M2 Muscarinic Receptor: Uncovering Molecular Recognition Exploiting Dimensionality Reduction and Enhanced Sampling" (seminario su invito) - Human Brain Project: Annual Meeting of the Co-Design Project 6 (CDP6) - Modeling for Drug Discovery, Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germania (2018)
6. "Exploration of Multiple Ligand Binding Pathways" (seminario su invito) at Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germania (2019)
7. "Exploration of Multiple Ligand Binding Pathways" (contributo) - Mainz Material Simulation Days 2019 - Max Planck Institute for Polymer Research, Magonza, Germania (2019)
8. "Exploration of Multiple Ligand Binding Pathways" (contributo) - Open software for enhanced sampling simulations, Lugano, Svizzera (2019)

Didattica

- A.A. 2015/16: Esercitatore per il corso di Fisica per la laurea triennale in Scienze Naturali (responsabile del corso: Prof. Alberto Vailati)
- A.A. 2016/17: Esercitatore per il corso di Fisica per la laurea triennale in Scienze Naturali (responsabile del corso: Prof. Alberto Vailati)
- A.A. 2016/17: Esercitatore per il corso di Fisica per la laurea triennale in Biotecnologie (responsabile del corso: Prof. Guido Tiana)

Relatore/Correlatore di tesi

Sono stato correlatore della tesi di laurea Magistrale in Fisica di Piero Valena (2017 - supervisore: Guido Tiana).

Pubblicazioni

Sono autore di 14 pubblicazioni (2 come corresponding author, 9 come primo autore), h-index (scopus)=4, numero di citazioni (scopus) 33.

1. *The PLUMED consortium*. "A community effort to promote transparency and reproducibility in enhanced molecular simulations", Accepted, Nat. Methods, (2019) (IF=26.919)
2. **R. Capelli***, **P. Carloni**, and **M. Parrinello**. "Exhaustive Search of Ligand Binding Pathways via Volume-based Metadynamics", J. Phys. Chem. Lett. 10, 3495-3499, (2019) DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b01183 (IF=8.709)
3. **R. Capelli***, **A. Boichichio**, **G.M. Piccini**, **R. Casasnovas**, **P. Carloni***, and **M. Parrinello**. "Chasing the full free energy landscape of neuroreceptor/ligand

- unbinding by metadynamics simulations”, *J. Chem. Theory Comput.* 15, 3354-3361, (2019) DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00118 (IF=5.399)
4. **F. Marchetti, R. Capelli, F. Rizzato, A. Laio*, and G. Colombo*.** “The subtle tradeoff between evolutionary and energetic constraints in protein-protein interactions”, *J. Phys. Chem. Lett.* 10, 1489-1497, (2019) DOI: 10.1021/acs.jpcllett.9b00191 (IF=8.709)
 5. **R. Capelli, S. Caracciolo, A. Di Gioacchino, and E. M. Malatesta.** “Exact value for the average optimal cost of bipartite traveling-salesman and 2-factor problems in two dimensions”, *Phys. Rev. E* (2018) 98, 030101 DOI: 10.1103/PhysRevE.98.030101 (IF=2.353)
 6. **R. Capelli, C. Peri, R. Villa, A. Nithichanon, O. Conchillo-Sole, D. Yero, P. Gagni, M. Chiari, G. Lertmemongkolchai, M. Cretich, X. Daura, M. Bolognesi, G. Colombo*, and L. J. Gourlay*.** “BPSL1626: Reverse and Structural Vaccinology Reveal a Novel Candidate for Vaccine Design Against *Burkholderia pseudomallei*” *Antibodies* 7, 26 (2018) DOI: 10.3390/antib7030026
 7. **R. Capelli, G. Tiana*, and C. Camilloni*.** “An implementation of the maximum-caliber principle by replica-averaged time-resolved restrained simulations”, *J. Chem. Phys.* 148, 184114 (2018) DOI: 10.1063/1.5030339 (IF=2.997)
 8. **L. Sola, P. Gagni, I. D’Annessa, R. Capelli, C. Bertino, A. Romanato, F. Damin, G. Bergamaschi, E. Marchisio, A. Cuzzocrea, M. Bombaci, R. Grifantini, M. Chiari, G. Colombo, A. Gori*, and M. Cretich*.** “Enhancing antibody serodiagnosis using a controlled peptide co-immobilization strategy” *ACS Infect. Dis.* 4, 998-1006, (2018) DOI: 10.1021/acsinfecdis.8b00014 (IF=4.911)
 9. **R. Capelli, E. Matterazzo, M. Amabili, C. Peri, A. Gori, P. Gagni, M. Chiari, G. Lertmemongkolchai, M. Cretich, M. Bolognesi, G. Colombo*, and L. J. Gourlay*.** “Designing probes for immunodiagnostics: structural insights into an epitope targeting *Burkholderia* infections” *ACS Infect. Dis.* 3, 736-743, (2017) DOI: 10.1021/acsinfecdis.7b00080 (IF=4.911) - **Cover article**
 10. **R. Capelli, F. Marchetti, G. Tiana and G. Colombo*.** “SAGE: a Fast Computational Tool for Linear Epitope Grafting onto a Foreign Protein Scaffold”, *J. Chem. Inf. Model.* 57, 6-10, (2017) DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00584 (IF=3.760)
 11. **F. Villemot, R. Capelli, G. Colombo and A. van der Vaart*.** “Balancing accuracy and cost of confinement simulations by interpolation and extrapolation of confinement energies”, *J. Chem. Theory Comput.* 12, 2779-2789, (2016) DOI:10.1021/acs.jctc.5b01183 (IF=5.399)
 12. **R. Capelli, F. Villemot, E. Moroni, G. Tiana, A. van der Vaart* and G. Colombo*.** “Assessment of mutational effects on peptide stability through confinement simulations”, *J. Phys. Chem. Lett.* 7 (1), 126-130, (2016) DOI:10.1021/acs.jpcllett.5b02221, (IF=8.709)
 13. **G. Tiana*, F. Villa, Y. Zhan, R. Capelli, C. Paissoni, P. Sormanni, E. Heard, L. Giorgetti and R. Meloni,** “MonteGrappa: an iterative Monte Carlo program to optimize biomolecular potentials in simplified models”, *Comput. Phys. Commun.* 186, 93-104, (2015) DOI:10.1016/j.cpc.2014.09.12 (IF=3.748)
 14. **R. Capelli, C. Paissoni, P. Sormanni and G. Tiana*.** “Iterative derivation of effective potentials to sample the conformational space of proteins at atomistic scale”, *J. Chem. Phys.* 140, 195101 (2014) DOI:10.1063/1.4876219 (IF=2.997)

Data

27.07.2019

Luogo

Jülich