

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 b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 02/D1, settore scientifico-disciplinare FIS/07 presso il Dipartimento di Bioscienze, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 47 del 14/06/2022) Codice concorso 5006.

Riccardo Capelli

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	CAPELLI
NOME	RICCARDO
DATA DI NASCITA	19/11/1987

RIEPILOGO DEGLI INTERESSI DI RICERCA

La mia attività di ricerca si concentra sulla biofisica teorica e computazionale, spaziando dallo sviluppo di metodi computazionali per il calcolo di proprietà di interesse in sistemi complessi, allo sviluppo e alla validazione di modelli semplificati per descrivere sistemi di interesse biologico. (I riferimenti tra parentesi si riferiscono all'elenco delle pubblicazioni a pagina 6).

- **Sviluppo e applicazione di tecniche di enhanced sampling**
Nell'ambito della dinamica molecolare classica ho applicato tecniche di enhanced sampling (in particolare la metadinamica) per lo studio di biomolecole (ref. 3,7,12,16,17) e materiali (ref. 6 e 13). In particolare, mi sono focalizzato sullo studio della termodinamica (ref. 17) e della cinetica (ref. 12) di un sistema di interesse clinico: il recettore muscarinico M_2 umano in complesso con il radioligando iperoxo. Inoltre, ho sviluppato in prima persona una variante della metadinamica, chiamata Volume-based Metadynamics (ref 16), che permette l'identificazione di tutti i possibili percorsi di legame in un sistema proteina/piccola molecola. Successivamente, ho migliorato l'efficienza e l'applicabilità di tale protocollo per il calcolo dell'energia libera di legame fra proteina e piccola molecola (ref. 3 e 7).
- **Studio di potenziali coevolutivi in sistemi proteici**
Ho contribuito allo sviluppo di un software per il calcolo di potenziali coevolutivi in sistemi proteici a partire da allineamenti curati. Ho applicato tale tecnica allo studio della rete di interazione intra-proteina nella famiglia delle G-protein coupled receptors (ref.14); lo studio delle superfici di interazione proteina-proteina (ref. 18) e infine lo studio della frustrazione dell'interazione intra-proteina in proteine ancestrali (ref. 9).
- **Sviluppo di metriche per la valutazione di sistemi multifase**
Ho sviluppato una metrica basata su dei descrittori alto-dimensionali, chiamati SOAP (Smooth Overlap of Atomic Position), che permette di valutare e classificare lo stato di sistemi multifase, come membrane lipidiche, misture soluto-solvente o sistemi in coesistenza di fase solido-liquido studiati mediante tecniche di dinamica molecolare/enhanced sampling. Tale metrica è stata usata per la classificazione di force field atomistici e coarse-grained (ref. 8) e nell'identificazioni di strutture ice-like in modelli classici dell'acqua (ref. 1).
- **Parametrizzazione e ottimizzazione di sistemi coarse-grained**
Ho contribuito allo sviluppo di un protocollo basato su FST-PSO (Fuzzy Self-Tuning Particle Swarm Optimization) per la parametrizzazione di sistemi classici a risoluzione coarse-grained (1 bead per 3-4 atomi) a partire da simulazioni a risoluzione atomistica, modificando in maniera automatica le interazioni bonded (ref. 10) e non-bonded (ref 5).

TITOLI

TITOLI DI STUDIO

- **Laurea magistrale in Fisica**, Università degli studi di Milano
Data di conseguimento: 12/02/2014
Voto di laurea 110/110.
Titolo della tesi: *“Building a model to describe the equilibrium state of small proteins”*
Relatori: Prof. Guido Tiana, Prof. Carlo Camilloni.
- **Laurea triennale in Fisica**, Università degli Studi di Milano
Data di conseguimento: 26/07/2011
Voto di laurea 100/110.
Titolo della tesi: *“Valutazione di ampiezze di scattering su scheda grafica”*
Relatori: Prof. Alessandro Vicini, Dr. Mario Raciti.

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA

- **Dottorato di ricerca in Fisica, Astrofisica e Fisica Applicata**, Università degli Studi di Milano
Data di conseguimento: 24/11/2017, XXX Ciclo.
Titolo della tesi: *“Computational modeling of proteins: from statistical mechanics to immunology”*
Relatori: Prof. Guido Tiana, Prof. Giorgio Colombo.

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

- Dal 01/04/2014 al 31/10/2014
Assegnista di Ricerca (legge 240/2010), Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare del CNR (ICRM-CNR), sede di Milano, presso il gruppo di biochimica computazionale del Dr. Giorgio Colombo nel contesto del progetto PROVA (Discovery/development of diagnostic PRObes and VAccine candidates targeting Burkholderia infections), finanziato da Regione Lombardia.
- Dal 23/04/2018 al 31/10/2019
Post-doctoral Scientist, Computational Biomedicine section (IAS-5/INM-9), Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germania, presso il gruppo del Prof. Paolo Carloni. La mia attività di ricerca era focalizzata sull'uso di tecniche di dinamica molecolare ed enhanced sampling per lo studio della cinetica e termodinamica di sistemi ligando-proteina e di effetti allosterici nella dinamica di proteine di membrana. Questo progetto di ricerca era inserito nel contesto del flagship project di EU Horizon2020 “Human Brain Project”.
- Dal 01/11/2019 al 31/08/2022 (previsto)
Assegnista di Ricerca (legge 240/2010), Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia (DISAT), Politecnico di Torino, presso il gruppo di chimica fisica computazionale del Prof. Giovanni Maria Pavan. La mia attività di ricerca è focalizzata sullo studio di materiali autoassemblanti e/o multifase studiati con metodi multiscala (atomistici e coarse-grained). Questo progetto di ricerca è inserito nel contesto dell'ERC Consolidator Grant “DYNAPOL”.

TITOLI DI CUI ALL'ARTICOLO 24 COMMA 3 LETTERA A) E B) DELLA LEGGE 30 DICEMBRE 2010, N. 240

- Dal 01/09/2022 al 31/08/2025 (previsto)
Ricercatore a tempo determinato (lettera a, SC 03/A2, SSD CHIM/02), Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale (DCCI), Università di Pisa. Sono risultato vincitore di una selezione per un posto da RTD di tipo a, e la presa di servizio prevista è per il 1° settembre p.v.

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

- Lezione e Seminario (2 ore) per il corso di dottorato “Models and Methods for Material and Environmental Sciences”, Università di Modena e Reggio Emilia, a.a. 2021/2022.
- Tutor (15 ore) per il corso di “Chimica e Laboratorio di Chimica”, laurea triennale in Ingegneria Aerospaziale, Politecnico di Torino, a.a. 2021/2022.
- Correlatore di 1 tesi di laurea magistrale in Fisica:
 1. Piero Valena (a.a. 2016/2017), titolo della tesi: *“Development of a model to study the thermodynamics of large protein system”*.
- Esercitazioni (16 ore) per il corso di “Fisica”, laurea triennale in Scienze Naturali, responsabile prof. Alberto Vailati, Università degli Studi di Milano, a.a. 2016/2017.
- Esercitazioni (24 ore) per il corso di “Fisica”, laurea triennale in Biotecnologie, responsabile prof. Guido Tiana, Università degli Studi di Milano, a.a. 2016/2017.
- Esercitazioni (16 ore) per il corso di “Fisica”, laurea triennale in Scienze Naturali, responsabile prof. Alberto Vailati, Università degli Studi di Milano, a.a. 2015/2016.

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI IN AGGIUNTA AI CONTRATTI DI ASSEGNO DI RICERCA;

- Aprile 2018-ottobre 2019: visiting scientist (multiple visite) presso il gruppo del Prof. Michele Parrinello, ETH Zurich/Università della Svizzera Italiana, Lugano, Svizzera. In totale il periodo passato in visita nel gruppo del prof. Parrinello ammonta ad 8 mesi.
- Settembre 2017: visiting PhD student presso il gruppo del prof. Nikolay Dokholyan, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA.
- Febbraio 2017: visiting PhD student presso il gruppo del prof. Alessandro Laio, SISSA, Trieste
- 5-16 dicembre 2016: partecipazione alla winter school “Quantitative System Biology” organizzata dall’International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste.
- 12-13 settembre 2016: partecipazione al corso “Enabling Software for Highly Scalable INTEL Architecture” organizzata dal CINECA, Segrate (MI).
- 26-30 gennaio 2015: partecipazione alla “XIX School of Pure and Applied Biophysics” organizzata dalla Società Italiana di Biofisica Pura ed Applicata (SIBPA), Venezia.
- 15-19 settembre 2014: partecipazione alla summer school “Atomistic Monte Carlo Simulations of Bio-molecular System” organizzata dal Centro Europeo di Calcolo Atomico e Molecolare (CECAM), Jülich, Germania.
- 9-28 luglio 2012: partecipazione alla summer school “Atomistic Simulation Techniques for Material science, Nanotechnology, and Biophysics” organizzata dal Centro Europeo di Calcolo Atomico e Molecolare (CECAM), SISSA, Trieste.
- 5-7 ottobre 2011: partecipazione al corso “GPU programming with CUDA” organizzata dal CINECA, Segrate (MI).

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

- Dal 01/11/2018 al 31/10/2019
Principal Investigator per il Grant computazionale da 2,000,000 core-h sul supercomputer JURECA: *“HPC-aided design of drugs with improved kinetics of binding”* assegnato con un Progetto VSR del consorzio JARA (Jülich-Aachen Research Alliance).
- 2020-2022
Investigator per lo European Partnering project della Helmholtz Society: *“Innovative high-performance computing approaches for molecular neuromedicine”* per un contributo di 750,000 €. Ho contribuito alla stesura e alla pianificazione del progetto di ricerca.

ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI, O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

- Dal 01/11/2019 ad oggi
Membro del gruppo di ricerca del prof. Giovanni Maria Pavan presso il Politecnico di Torino nel contesto dell'ERC grant DYNAPOL. Durante il periodo come assegnista di ricerca ho collaborato attivamente alla supervisione di 4 dottorandi (come testimoniato dalle pubblicazioni elencate nella sezione a pagina 6):
 1. Andrea Gardin, ref. 8;
 2. Luigi Leanza, ref. 4 e 6;
 3. Cristina Caruso, ref. 5;
 4. Mattia Perrone, ref. 5.Inoltre, ho partecipato attivamente a collaborazioni nazionali (prof. C. Micheletti, SISSA, Trieste) ed internazionali (prof. R. Banerjee, IISER, Calcutta, India; prof. S. J. George, JNCASR, Bangalore, India; prof. E. W. Meijer, TU Eindhoven, Eindhoven, Paesi Bassi; prof. E. E. Simanek, Texas Christian University, Fort Worth, TX, USA).
- Dal 23/04/2018 al 31/10/2019
Membro del gruppo di ricerca del prof. Paolo Carloni presso il Forschungszentrum Jülich. Durante il periodo come postdoctoral scientist la mia attività era svolta nel contesto dello “Human Brain Project”, in particolare nel sottoprogetto SP6 (Brain Simulation platform) dove sono stato coinvolto nello sviluppo di una piattaforma online sul portale HBP per la condivisione dati e lo sviluppo di “in silico experiments” accessibili agli scienziati e al grande pubblico. Durante questo periodo ho inoltre collaborato con alcuni gruppi di ricerca nazionali (prof. A. Giorgetti, Università di Verona) ed internazionali (prof. Ursula Röthlisberger, EPFL, Losanna, Svizzera; prof. Michele Parrinello, ETHZ/USI, Lugano, Svizzera).
- Dal 01/11/2014 al 31/10/2017
Membro del gruppo di ricerca del prof. Guido Tiana presso l'Università degli Studi di Milano come dottorando. Durante questo periodo sono stato correlatore di una tesi magistrale in fisica (vedi sopra) e ho sviluppato collaborazioni in ambito nazionale (prof. Carlo Camilloni, Università degli Studi di Milano).
- Dal 01/04/2014 al 31/10/2017
Membro del gruppo di ricerca del prof. Giorgio Colombo presso l'Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare del CNR, sede di Milano, prima come assegnista, poi come dottorando. Durante questo periodo ho sviluppato collaborazioni in ambito nazionale (prof. A. Laio, SISSA, prof. L. J. Goulay e prof. M. Bolognesi, Università degli Studi di Milano) e internazionale (prof. A. van der Vaart, University of South Florida, FL, USA).

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- Dal 05/09/2021 al 8/09/2021 (previsto)
Seminario su invito *“Identification of ice-like structures in rigid classical water models at room conditions”* presso il workshop “Physics of Biomolecules: Structure, Dynamics and Function”, Bressanone (BZ).
- Dal 05/04/2021 al 16/04/2021

Seminario su invito “*Accuracy of in silico kinetics calculations using infrequent metadynamics: the case of M2/iperovo unbinding*” presso l’ACS Spring Meeting (evento online a causa della pandemia di COVID-19) nel simposio “Kinetics of Macromolecular Systems: Methods and Applications”.

- Dal 26/11/2019 al 27/11/2019
Seminario su invito “*Ligand unbinding from the M2 muscarinic receptor: uncovering molecular recognition exploiting dimensionality reduction and enhanced sampling*” presso il “German workshop on structural prediction of membrane proteins. From ion channels to G-protein coupled receptors”, Jülich, Germania.
- Dal 24/07/2019 al 27/04/2019
Seminario “*Exploration of multiple binding pathways*” presso il CECAM Workshop “Open source software for enhanced sampling simulations”, Lugano, Svizzera.
- Dal 05/07/2019 al 07/04/2019
Seminario “*Exploration of multiple binding pathways*” presso il “Mainz Material Simulations Days”, Maganza, Germania.
- Dal 04/02/2019 al 06/02/2019
Poster “*Unconverging molecular recognition of a ligand binding to the M2 muscarinic receptor*” presso il CECAM Workshop “Multiscale modeling from macromolecules to cell: opportunities and challenges of biomolecular simulations”, Losanna, Svizzera.
- Dal 15/10/2018 al 18/10/2018
Poster “*Modeling and simulation in SP6: recent advances in methods development at the molecular level*” presso lo “Human Brain Project Summit 2018”, Maastricht, Paesi Bassi.
- Dal 05/12/2016 al 16/12/2016
Poster “*Automated scan and scoring of epitope grafting position candidates*” presso la winter school “Quantitative System Biology” svolta presso l’ICTP, Trieste.
- 24/09/2015
Seminario “*Path-independent free energy evaluation of amino acid mutations*” presso il convegno “Condensed Matter Highlight” svolta presso l’Università degli Studi di Milano.
- 15/01/2015
Seminario “*The role of surface energetics in the formation of protein-antibody interaction*” presso il workshop “Complex system group at UNIMI” svolta presso l’Università degli Studi di Milano.

ATTIVITÀ DI RELATORE SU INVITO PRESSO GRUPPI DI RICERCA

- 10/02/2022
Seminario “*Identification of ice-like structures in rigid classical water models at room conditions*” presso il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, dell’Università di Modena e Reggio Emilia, Modena. Ospite: Dr. Francesco Muniz-Miranda.
- 18/10/2019
Seminario “*Exploration of multiple ligand binding pathways*” presso il Jülich Supercomputing Center (JSC) del Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germania.
- 14/05/2019
Seminario “*Exploration of multiple binding pathways*” presso il Dipartimento di Biochimica Teorica del Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germania. Ospite: Prof. Dr. Marcus Elstner.
- 30/10/2018
Seminario “*Ligand unbinding from the M2 muscarinic receptor: uncovering molecular recognition exploiting dimensionality reduction and enhanced sampling*” presso il Forschungszentrum Jülich, Germania.
- 22/02/2018
Seminario “*Biased molecular simulations of non-equilibrium protein dynamics*” presso l’istituto

IAS-5/INM-9 (Computational Biomedicine) del Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germania. Ospite: Prof. Paolo Carloni.

- 30/01/2018
Seminario “*Biased molecular simulations of non-equilibrium protein dynamics*” presso l’Istituto di Scienze Computazionali dell’Università della Svizzera Italiana, Lugano, Svizzera. Ospite: Prof. Michele Parrinello.

ABILITAZIONI SCIENTIFICHE NAZIONALI CONSEGUITE

- Dal 25/01/2022 al 25/01/2032
Abilitazione scientifica nazionale al ruolo di professore di II fascia in **Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica** (SC 02/D1, SSD FIS/07).
- Dal 30/05/2022 al 30/05/2032
Abilitazione scientifica nazionale al ruolo di professore di II fascia in **Fisica Teorica della Materia** (SC 02/B2).
- Dal 01/06/2022 al 01/06/2032
Abilitazione scientifica nazionale al ruolo di professore di II fascia in **Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche** (SC 03/A2).

ATTIVITÀ DI REVISORE PER RIVISTE E PROGETTI FINANZIATI

Revisore per riviste: Scientific Reports; Journal of Chemical Information and Modeling; Canadian Journal of Chemical Engineering; Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics; Journal of Chemical Theory and Computation.

Revisore per progetti: EUTOPIA-SIF Fellowship, ERC Advanced Grant.

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

28 pubblicazioni (tutte sottoposte a revisione tra pari), **12** come primo autore (+1 co-primo autore), **8** come autore corrispondente.

Indici Bibliometrici (al 22/06/2022):

- Scopus: H-index 9, numero di citazioni 475.
- Web of Science: H-index 9, numero di citazioni 469.
- Google Scholar: H-index 11, numero di citazioni 605.

Lista delle pubblicazioni

(* indica il corresponding author, † indica un contributo equivalente)

1. **R. Capelli***, F. Muniz-Miranda, G. M. Pavan*. “*Ephemeral Ice-Like Local Environments in Classical Rigid Models of Liquid Water*”. Journal of Chemical Physics 156 (21), 214503 (2022). DOI: 10.1063/5.0088599
2. K. Ahmad, A. Rizzi, **R. Capelli**, D. Mandelli, W. Lyu, and P. Carloni*. “*Enhanced-sampling simulations for the estimation of non-covalent ligand binding kinetics: current status and perspectives*”. Frontiers in Molecular Biosciences 9, 899805 (2022). DOI: 10.3389/fmolb.2022.899805
3. L. Hoang Gia†, J. Goßen†, **R. Capelli***, T. T. Nguyen, Z. Sun, K. Zuo, J. Schulz, G. Rossetti*, P. Carloni. “*Multiple poses and thermodynamics of ligands targeting protein surfaces: the case of furosemide binding to mitoNEET in aqueous solution*”. Frontiers in Cell and Developmental Biology 10, 886568 (2022). DOI: 10.3389/fcell.2022.886568
4. K. Koner, S. Karak, S. Kandambeth, S. Karak*, N. Thomas, L. Leanza, C. Perego, L. Pesce, **R. Capelli**, M. Moun, M. Bhakar, T. G. Ajithkumar, G. M. Pavan*, and R. Banerjee*. “*Porous covalent organic nanotubes and their assembly in loops and toroids*”. Nature Chemistry 14, 507-514 (2022), DOI: 10.1038/s41557-022-00908-1

5. C. Empereur-mot*, R. Capelli, M. Perrone, C. Caruso, G. Doni, and G. M. Pavan*. "Automatic Multi-Objective Optimization of Coarse-Grained Lipid Force Fields Using SwarmCG". *Journal of Chemical Physics* 156 (2), 024801 (2022), DOI: 10.1063/5.0079044
6. E. Weyandt, L. Leanza, R. Capelli, G. M. Pavan, G. Vantomme, and E.W. Meijer*. "Controlling the length of porphyrin-based supramolecular polymers via coupled equilibria and dilution induced self-assembly". *Nature Communications* 13, 248 (2022), DOI 10.1038/s41467-021-27831-2
7. Q. Zhao, R. Capelli*, P. Carloni, B. Lüscher, J. Li, and G. Rossetti*. "Enhanced Sampling Approach to the Induced Fit Docking Problem in Protein-Ligand Binding: the case of mono-ADP-ribosylation hydrolases inhibitors". *Journal of Chemical Theory and Computation* 17, 7899-7911 (2021), DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00649
8. R. Capelli*, A. Gardin, C. Empereur-mot, G. Doni, and G. M. Pavan*. "A Data-Driven Dimensionality Reduction Approach to Compare and Classify Lipid Force Fields". *Journal of Physical Chemistry B* 125, 7785--7796 (2021), DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c02503
9. M. Crippa†, D. Andregretti†, R. Capelli, and G. Tiana*. "Evolution of Frustrated and Stabilising Contacts in Reconstructed Ancient Proteins" *European Biophysics Journal* 50, 699-712 (2021), DOI: 10.1007/s00249-021-01500-0
10. C. Empereur-mot*, L. Pesce, G. Doni, D. Bochicchio, R. Capelli, C. Perego, and G. M. Pavan*. "Swarm-CG: Automatic Parametrization of Bonded Terms in MARTINI-based Coarse-Grained Models of Simple to Complex Molecules via Fuzzy Self-Tuning Particle Swarm Optimization". *ACS Omega* 5, 50, 32823-32843 (2020) DOI: 10.1021/acsomega.0c05469
11. C. Perego, L. Pesce, R. Capelli, S. J. George, and G. M. Pavan*. "Multiscale Molecular Modelling of ATP-fueled Supramolecular Polymerisation and Depolymerisation". *ChemSystemsChem* 2, e2000038, (2020) DOI: 10.1002/syst.202000038
12. R. Capelli*†, W. Lyu†, V. Bolnykh, S. Meloni, J. M. H. Olsen, U. Rothlisberger, M. Parrinello, and P. Carloni. "Accuracy of Molecular Simulation-based Predictions of $k_{\text{textsubscript{off}}}$ Values: a Metadynamics Study". *Journal of Physical Chemistry Letters* 11, 6373-6381, (2020) DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c00999
13. A. Sarkar, T. Behera, R. Sasmal, R. Capelli, C. Empereur-mot, J. Mahato, S. S. Agasti*, G. M. Pavan*, A. Chowdhury*, and S. J. George*. "Cooperative Supramolecular Block Copolymerization for the Synthesis of Functional Axial Organic Heterostructures". *Journal of the American Chemical Society* 142(26), 11528-11539 (2020) DOI: 10.1021/jacs.0c04404
14. F. Baldessari, R. Capelli*, P. Carloni, and A. Giorgetti. "Coevolutionary Data-based Interaction Networks Approach Highlighting Key Residues across Protein Families: the Case of the G-protein Coupled Receptors". *Computational and Structural Biotechnology Journal* 18, 1153-1159, (2020) DOI: 10.1016/j.csbj.2020.05.003
15. The PLUMED consortium. "Promoting transparency and reproducibility in enhanced molecular simulations". *Nature Methods* 16(8), 670-673, (2019) DOI: 10.1038/s41592-019-0506-8
16. R. Capelli*, P. Carloni, and M. Parrinello. "Exhaustive Search of Ligand Binding Pathways via Volume-based Metadynamics". *Journal of Physical Chemistry Letters* 10, 3495-3499, (2019) DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b01183
17. R. Capelli*, A. Bochicchio, G.M. Piccini, R. Casasnovas, P. Carloni*, and M. Parrinello. "Chasing the full free energy landscape of neuroreceptor/ligand unbinding by metadynamics simulations". *Journal of Chemical Theory and Computation* 15, 3354-3361, (2019) DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00118
18. F. Marchetti†, R. Capelli†, F. Rizzato†, A. Laio*, and G. Colombo*. "The subtle tradeoff between evolutionary and energetic constraints in protein-protein interactions". *Journal of Physical Chemistry Letters* 10, 1489-1497, (2019) DOI: 10.1021/acs.jpcclett.9b00191
19. 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". *Physical Review E* (2018) 98, 030101 DOI: 10.1103/PhysRevE.98.030101
20. R. Capelli, C. Peri, R. Villa, A. Nithichanon, O. Conchillo-Solé, D. Yero, P. Gagni, M. Chiari, G. Lertmemongkolkhai, 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
21. R. Capelli, G. Tiana*, and C. Camilloni*. "An implementation of the maximum-caliber principle by replica-averaged time-resolved restrained simulations". *Journal of Chemical Physics* 148, 184114 (2018) DOI: 10.1063/1.5030339
22. 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 Infectious Diseases* 4, 998-1006, (2018) DOI: 10.1021/acsinfecdis.8b00014

23. **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 Infectious Diseases 3, 736-743, (2017) DOI: 10.1021/acsinfecdis.7b00080
24. **R. Capelli**, F. Marchetti, G. Tiana and G. Colombo*. *"SAGE: a Fast Computational Tool for Linear Epitope Grafting onto a Foreign Protein Scaffold"*. Journal of Chemical Information and Modeling 57, 6-10, (2017) DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00584
25. 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"*. Journal of Chemical Theory and Computation 12, 2779-2789, (2016) DOI: 10.1021/acs.jctc.5b01183
26. **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"*. Journal of Physical Chemistry Letters 7 (1), 126-130, (2016) DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5b02221
27. 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"*. Computer Physics Communications 186, 93-104, (2015) DOI: 10.1016/j.cpc.2014.09.12
28. **R. Capelli**, C. Paissoni, P. Sormanni and G. Tiana*. *"Iterative derivation of effective potentials to sample the conformational space of proteins at atomistic scale"*. Journal of Chemical Physics 140, 195101 (2014) DOI: 10.1063/1.4876219

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE SOTTO REVISIONE

1. M. Becchi, **R. Capelli**, C. Perego, G. M. Pavan*, and C. Micheletti*. *"Complexity Emerging from Crowding in a Self-Limited Self-Assembling System"*.
2. L. Di Cairano, **R. Capelli**, G. Bel-Hadj-Aissa, and M. Pettini. *"Topological origin of protein folding transition"*.
3. **R. Capelli**, A. Menke, H. Pan, B. G. Janesko, E. E. Simanek*, and G. M. Pavan*. *"Well-tempered Metadynamics Simulations Predicts the Structural and Dynamic Properties of a Chiral 24-Atom Macrocyclic in Solution"*.
4. **R. Capelli**, S. A. Serapian, and G. Colombo*. *"Computational Epitope Prediction and Design for Antibody Development and Detection"*

Data

22/06/2022

Luogo

Milano