## Dati Anagrafici

| | |
|---|---|
| Nome e Cognome | Riccardo Chelli |
| Data di nascita | 28 Aprile 1969 |
| Nazionalità | Italiana |
| Titolo di studio | Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche |

## Contatti


| | |
|---|---|
| Indirizzo | Dipartimento di Chimica, Università di Firenze,<br>Via della Lastruccia 3, 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italia |
| E-mail | riccardo.chelli@unifi.it |
| Telefono | +39-0554573082 |
| Skype | riccardo.chelli1 |
| Home page | www.chim.unifi.it:/u/chelli |


## Attuale Posizione

Professore Associato per il settore di Chimica Fisica presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze.

## Percorso Scientifico e Professionale

| | |
|---|---|
| 1988 | Diploma di maturità conseguito presso il Liceo Scientifico G. Castelnuovo di Firenze (voto: 55/60). |
| 1996 | Laurea in Chimica conseguita presso l'Università degli Studi di Firenze (voto: 110/110 con lode; media esami: 29,3/30). Titolo della tesi: *Struttura e dinamica orientazionale del cristallo di cianuro di sodio nella fase plastica*. Relatore: Prof. Salvatore Califano. |
| 1997 | Abilitazione alla professione di chimico. |
| 2000 | Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università degli Studi di Firenze. Titolo della tesi *Esperimenti numerici: metodi e applicazioni*. Tutore: Prof. Salvatore Califano. |
| 2001 - 2004 | Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze. |
| 2005 - 2006 | Titolare di una borsa di studio bandita dal Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM). |
| 2007 | Titolare di una borsa di studio bandita dal Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze, cofinanziata dall'European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy di Sesto Fiorentino (Firenze). |
| Gen 2008 - Feb 2008 | Contratto con il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze per realizzare un progetto di ricerca dal titolo "Studio delle interazioni fra residui planari in strutture proteiche risolte sperimentalmente". |
| Mar 2008 - Feb 2009 | Assegnista di Ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze. |
| Feb 2009 - Sett 2015 | Ricercatore a tempo indeterminato presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (settore scientifico disciplinare CHIM/02 - Chimica Fisica). |
| Ott 2015 - Oggi | Professore Associato presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (settore scientifico disciplinare CHIM/02 - Chimica Fisica). |
| 2016 - Oggi | Membro della Giunta del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze. |
| 2016 - Oggi | Membro della Commissione di Indirizzo e Autovalutazione del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze. |

2009 - 2014; 2017 - Oggi: Membro del Collegio dei Docenti per la Scuola di Dottorato in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Firenze.

2019 - Oggi: Membro del Consiglio della Scuola di Scienze della Salute Umana dell'Università degli Studi di Firenze.

## Ricerca presso Atenei/Istituti Esteri e Internazionali

Mar 2004 - Giu 2004: Ospite del Prof. Shaul Mukamel presso il Dipartimento di Chimica dell'Universtà della California, Irvine, USA.

Lug 2012 - Ago 2012: Ospite del Dott. Nohad Gresh presso il Laboratorio di Chimica e Biochimica Farmacologiche e Tossicologiche dell'Università Paris Descartes, Parigi, Francia.

Dic 2014: Ospite del Prof. Jean-Philip Piquemal presso L'Istituto di Chimica-Fisica e Chimica-Teorica dell'Università Pierre e Marie Curie (Università della Sorbona), Parigi, Francia.

## Interessi di Ricerca ed Attività Scientifica

DESCRIZIONE SINTETICA DEGLI INTERESSI DI RICERCA

1. Sviluppo di schemi numerici per il campionamento dello spazio delle fasi ed il calcolo di proprietà chimico-fisiche di sistemi mediante simulazioni computazionali (dinamica molecolare e Monte Carlo).
2. Aspetti teorici della termodinamica di non equilibrio.
3. Sviluppo di campi di forza polarizzabili per simulazioni di dinamica molecolare.
4. Modellistica molecolare di sistemi semplici e complessi correlati ad aspetti di interesse biofisico e biochimico.
5. Studio di proprietà dinamiche e strutturali di molecole isolate, aggregati molecolari e sistemi in fase condensate tramite meccanica/dinamica molecolare e metodi quanto-meccanici.
6. Studio delle relazioni esistenti fra le proprietà dinamico-strutturali di biomolecole e di liquidi semplici e la loro attività ottica: elaborazione di modelli utili per l'interpretazione o la predizione di misure di spettroscopia ottica.

DESCRIZIONE DETTAGLIATA DELLA RICERCA

L'attività di ricerca svolta è essenzialmente di tipo teorico-computazionale. Tematiche più strettamente teoriche sono rivolte soprattutto al campo dei modelli di potenziale di interazione intermolecolare, a quello della meccanica statistica di non equilibrio ed in generale alle metodologie di campionamento in simulazioni computazionali. La formazione scientifica è centrata attorno a conoscenze acquisite in merito a tecniche di dinamica molecolare classica durante la realizzazione della Tesi di Laurea (1995-1996) e negli anni immediatamente successivi. Per questo motivo i primi lavori (1997-1999) riguardano esclusivamente studi di sistemi in fase condensata effettuati tramite simulazioni di dinamica molecolare. A partire dalla seconda metà del triennio di Dottorato di Ricerca (1999-2000), l'interesse si rivolge anche allo studio e allo sviluppo di metodi computazionali nell'ambito della meccanica molecolare. Quasi contemporaneamente iniziano ad essere trattati vari aspetti della modellistica molecolare di sistemi di interesse biochimico, con particolare riguardo alla natura delle interazioni intermolecolari e alla caratterizzazione dei sistemi in termini di proprietà termodinamiche. A partire dagli anni 2005-2006, l'interesse sviluppato per la determinazione di superfici di energia libera di sistemi complessi si rivolge anche verso tematiche attinenti lo sviluppo di algoritmi per il calcolo di profili di energia libera lungo generiche coordinate di reazione per mezzo di dinamica molecolare forzata e simulazioni con campionamento di equilibrio non-Boltzmaniano.

Nonostante il taglio teorico generalmente impresso alle ricerche effettuate, un numero significativo di lavori è frutto di collaborazioni con gruppi di ricerca sperimentali, soprattutto nel settore spettroscopico molecolare. In questo caso il contributo fornito alla ricerca va dal supporto teorico-computazionale per l'interpretazione dei dati sperimentali, alla discussione ed interpretazione degli stessi dati sulla base di modelli e teorie.

In maggior dettaglio l'attività scientifica può essere suddivisa in quattro tematiche principali:

(a) studio di proprietà dinamiche e strutturali di sistemi in fase condensata;

(b) studio di proprietà dinamiche e strutturali di molecole isolate e complessi molecolari;

(c) modellistica molecolare su sistemi di interesse biochimico e biofisico;

(d) studio e sviluppo di metodi computazionali.

Descrizioni di queste tematiche sono riportate di seguito.

a. Studio di proprietà dinamiche e strutturali di sistemi in fase condensata

Gli studi di fasi condensate della materia sono rivolti all'analisi delle proprietà strutturali e dinamico-spettroscopiche di sistemi che si trovano in uno stato disordinato (liquido o vetroso) o parzialmente disordinato (fase cristallina plastica). Solo marginalmente sono stati studiati sistemi in fase cristallina. Lo studio della fase cristallina plastica del cianuro di sodio[99, 100] si colloca nella prima parte dell'attività scientifica ed ha riguardato l'analisi dei meccanismi di accoppiamento roto-traslazionale fra lo ione sodio e lo ione cianuro. La dinamica del sistema è stata caratterizzata in termini dei modi locali di simmetria relativi all'anione e alla gabbia dei cationi primi vicini. Un accoppiamento di natura collettiva descritto in base ai modi fononici del cristallo è stato altresì individuato e caratterizzato.

Particolare attenzione è stata data alla determinazione delle strutture a medio e corto raggio di liquidi caratterizzati sia da deboli che da forti interazioni intermolecolari e delle correlazioni esistenti fra le proprietà strutturali e dinamiche osservate in tali sistemi. Maggiore interesse è stato dedicato allo studio di sistemi capaci di formare legami ad idrogeno (glicerolo[71, 97, 98], glicole propilenico[54], metanolo[96, 94], metatoluidina[78, 79, 84], ottanolo[65], acido formico[67] e formamide[35, 42, 32]) ed in particolare si è approfondito lo studio degli effetti del legame ad idrogeno sulle proprietà dinamico-strutturali della fase liquida pura. Fra gli studi riguardanti questo argomento, è da rilevare quello relativo alla fase liquida del metanolo[96] realizzato mediante una simulazione di dinamica molecolare associata all'analisi dell'attività infrarossa e Raman effettuata con un modello molecolare polarizzabile basato sull'equalizzazione del potenziale chimico. Questo studio ha permesso di valutare l'importanza degli effetti di polarizzazione molecolare sugli spettri infrarosso e Raman di bassa frequenza del metanolo liquido.

Riguardo ai sistemi che formano deboli interazioni intermolecolari, uno dei più rappresentativi è sicuramente il benzene. Allo studio della fase liquida di questa molecola sono state dedicate tre pubblicazioni[89, 90, 91], finalizzate alla caratterizzazione della dinamica sia intermolecolare che intramolecolare. In particolare sono stati effettuati studi per comprendere la dinamica molecolare di questo sistema rilevata con le spettroscopie Raman, infrarossa[91], e di effetto Kerr ottico[89, 90]. A tal riguardo l'utilizzo concertato di misure di effetto Kerr ottico[90] e di simulazioni di dinamica molecolare[89] ha permesso un'approfondita caratterizzazione dei modi vibrazionali intermolecolari in termini delle loro componenti traslazionali e rotazionali.

b. Studio di proprietà dinamiche e strutturali di molecole isolate e complessi molecolari

Le ricerche effettuate su singole molecole e complessi molecolari sono indirizzate principalmente alla determinazione delle loro proprietà strutturali e termodinamiche, nonchè allo studio della loro attività spettroscopica di origine vibrazionale ed elettronica. In tale ambito sono state effettuate ricerche sia di esclusivo carattere computazionale, sia finalizzate all'interpretazione di dati sperimentali ottenuti in collaborazione con gruppi di ricerca sperimentali. Di rilievo sono gli studi computazionali effettuati con metodi *ab initio* e rivolti alla determinazione dell'abbondanza relativa dei vari conformeri di glicerolo in fase liquida[93] e gassosa[92]. Da una parte è stata effettuata un'analisi comparativa fra gli spettri infrarosso e Raman calcolati e quelli determinati sperimentalmente[93]. Dall'altra parte, quantità molecolari basate sul concetto di funzione di partizione sono state determinate con metodi *ab initio* per valutare le costanti di equilibrio per le varie coppie dei possibili conformeri di glicerolo[92].

Ulteriori studi su singole molecole riguardano misure di spettri fotoelettronici di stato eccitato dell'anisolo[87]. La combinazione di calcoli *ab initio* con i risultati spettroscopici ha portato alla determinazione e assegnamento dei modi normali dell'anisolo nella sua forma neutra e cationica.

Le ricerche su complessi molecolari riguardano il complesso 1:1 anisolo-$CO_2$[76], il complesso 1:1 anisolo-acqua[73, 75], il dimero di toluene[85], complessi formati da composti macrociclici poliamminici con alogenuri[22, 27] e complessi formati da un policarbossilato poliamminico, metalli pesanti e NO[45]. Relativamente al primo complesso, aggregati molecolari raffreddati con getto ad espansione supersonica sono stati sottoposti a misure di spettroscopia REMPI (Resonance Enhanced Multi-Photon Ionization). I risultati sperimentali sono stati interpretati con l'ausilio di calcoli *ab initio* che hanno permesso sia di individuare possibili strutture del complesso molecolare, sia di stimare le frequenze vibrazionali corrispondenti a tali strutture. Il secondo tipo di complesso anisolo-acqua, così come quello anisolo-$CO_2$, è stato studiato sia per via teorica che sperimentale. In particolare esperimenti di spettroscopia elettronica insieme a calcoli di meccanica molecolare sono stati usati per determinare la struttura del complesso nello stato fondamentale e nel primo stato elettronico eccitato[75]. Infine la struttura del dimero di toluene è stata determinata e discussa in termini di effetto competitivo fra interazioni di tipo dispersivo-repulsivo ed elettrostatiche[85]. Complessi di due specie di macrocicli poliamminici contenenti un gruppo acridinico sono stati studiati con tecniche computazionali *ab initio* e spettrofluorometriche per determinarne le capacità come chemosensori per alogenuri[22, 27]. Uno studio teorico e sperimentale di vari complessi formati da un policarbossilato poliamminico e vari metalli ha permesso di determinare l'affinità di questi composti con il monossido di azoto. La capacità di sequestro selettivo per questo tipo di ossido è stata correlata a possibili attività antiinfiammatorie dei leganti[45]. Altre ricerche classificabili insieme a quelle riguardanti i complessi molecolari sono relative a coppie di residui aminoacidici aromatici[82]. Tuttavia data la specifica finalità di tali studi, ovvero la caratterizzazione e razionalizzazione delle interazioni fra molecole modello di interesse biochimico, la loro descrizione sarà presentata nella discussione della Tematica (c).

c. Modellistica molecolare su sistemi di interesse biochimico

Ulteriori studi sono rivolti a sistemi modello per l'indagine dei meccanismi implicati nei processi di ripiegamento delle proteine. Da un lato sono state svolte indagini sulle interazioni specifiche fra coppie di residui aromatici sia in funzione di vincoli di distanza fra tali residui, sia in funzione dell'ambiente in cui essi sono immersi[83, 88]. Dall'altro lato le interazioni fra i residui aminoacidici sono state studiate ad un livello più semplice, basato su statistiche effettuate su un vasto insieme di strutture proteiche determinate sperimentalmente[46, 61, 77]. Tali studi hanno permesso di stimare un'energia libera media relativa alle mutue interazioni dei vari residui aminoacidici e all'interazione fra questi residui ed il solvente.

Per caratterizzare ancor più dettagliatamente la natura delle interazioni fra i residui aminoacidici aromatici, sono state fatte indagini di meccanica molecolare classica ed *ab initio* su complessi molecolari costituiti da coppie di residui aromatici[82] (triptofano, fenilalanina e tirosina). L'attenzione è stata soprattutto rivolta alla caratterizzazione della superficie di energia potenziale in relazione al ruolo svolto dalle interazioni dispersive ed elettrostatiche. Inoltre sono state individuate le regioni del volume molecolare in cui la densità elettronica risulta maggiormente perturbata dalla mutua interazione dei residui.

Uno studio correlato alla tematica qui discussa è quello relativo alla determinazione dello stato di protonazione dell'istidina situata nel core delle strutture proteiche[74]. Tramite tecniche di meccanica molecolare e teorie statistiche avanzate è stato mostrato che nelle proteine depositate nella banca dati PDB l'assegnamento dello stato di protonazione delle istidine è essenzialmente casuale. L'algoritmo proposto per l'assegnamento dello stato di protonazione dell'istidina si è dimostrato affidabile nei casi in cui lo stato tautomerico dell'istidina è stato determinato per diretta osservazione sperimentale.

Riguardo alla problematica dei fenomeni di ripiegamento delle proteine, è stata effettuata un'indagine specifica su proteine prioniche cellulari al fine di determinare le dinamiche di ripiegamento che eventualmente portano alla transizione conformazionale verso forme patogene responsabili dell'insorgenza di malattie note con il nome di encefalopatie spongiformi trasmissibili[69]. Una vasta serie di simulazioni di dinamica molecolare del prione di topo nella forma nativa e del suo mutante D178N è stata realizzata sia in soluzione di tetracloruro di carbonio (per riprodurre l'eventuale ambiente idrofobico in cui i prioni si possono trovare durante la transizione patogena) sia in soluzione acquosa. Il risultato rilevante di questo studio è una certa evidenza che la transizione conformazionale delle proteine prioniche verso la forma patogena avvenga previa rottura del $\beta$-foglietto esistente nella loro forma cellulare. Per confermare questo risultato da un punto di vista più strettamente quantitativo, lo stesso problema è stato affrontato utilizzando il cosiddetto metodo della metadinamica[62]. Il profilo di energia libera calcolato lungo una coordinata di reazione correlata alla rottura/formazione del $\beta$-foglietto della proteina prionica ha confermato i risultati ottenuti con le simulazioni di dinamica molecolare citate sopra[69].

Un argomento correlato allo studio e alla modellizzazione di sistemi biochimicamente rilevanti riguarda la serie di ricerche realizzate su membrane fosfolipidiche[36, 51, 60, 63], condotte in collaborazione con un gruppo di ricerca dell'European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy (LENS) di Sesto Fiorentino (Firenze). In particolare si è studiata la struttura e la dinamica della regione polare di alcuni tipi di membrane fosfolipidiche sia per mezzo di misure di spettroscopia infrarossa bidimensionale sia mediante simulazioni di dinamica molecolare. Le peculiarità del comportamento spettroscopico non lineare di tali sistemi sono state interpretate in termini della natura eccitonica dell'accoppiamento fra i modi locali di vibrazione e delle proprietà strutturali correlate. Durante questa collaborazione è stato inoltre sviluppato un algoritmo specifico per il fit di spettri infrarossi bidimensionali di un sistema a 3 livelli[47]. Test molto soddisfacenti sono stati ottenuti nel caso di un dipeptide Gly-Ala in soluzione 1:1 DMSO:$D_2O$.

d. Studio e sviluppo di metodi computazionali

Parallelamente alle indagini su sistemi specifici (molecole isolate, aggregati molecolari e fasi massive) ed alla modellistica molecolare, sono stati proposti nuovi metodi per il calcolo di proprietà chimico-fisiche mediante simulazioni di dinamica molecolare classica. In particolare sono stati sviluppati nuovi metodi per il calcolo della diffusione elastica di neutroni[99] e del calore specifico a partire dalle variabili dinamiche di un sistema[98], cioè coordinate e velocità atomiche.

Una parte sostanziale dell'attività di sviluppo di nuove metodologie computazionali riguarda il trattamento delle interazioni elettrostatiche per introdurre gli effetti di polarizzazione elettronica nelle tecniche computazionali di meccanica e dinamica molecolare classica[52, 64, 68, 72, 80, 81, 86, 95, 96]. L'importanza di tali studi non risiede solo nel fatto di formulare modelli fisicamente più realistici per il trattamento teorico dei sistemi molecolari, ma anche nella possibilità di costruire veri e propri campi di forza elettrostatici polarizzabili che siano trasferibili tanto ai sistemi semplici, quanto a quelli più complessi di interesse biochimico. Nell'approccio seguito, tale trasferibilità assume una duplice valenza. Da un lato è possibile descrivere una vasta quantità di composti usando parametri atomici, quali elettronegatività e durezza, determinati per un insieme ristretto di atomi (così come avviene per i comuni campi di forza non polarizzabili quali AMBER, CHARMM, GROMOS, etc.). Dall'altro lato, con lo stesso insieme di parametri atomici, è possibile trattare un sistema molecolare indipendentemente dalle condizioni termodinamiche e dall'ambiente in cui si trova. In relazione alla problematica dei campi di forza polarizzabili appena discussa, sono state svolte ricerche con lo scopo di valutare l'importanza del trasferimento di carica intermolecolare in sistemi che formano legami ad idrogeno, quali l'acqua[68, 70] ed il metanolo[70], in fase liquida e in piccoli aggregati molecolari. Inoltre è stato studiato l'effetto perturbativo di cariche monovalenti e bivalenti positive sulla densità elettronica della molecola d'acqua[64]. Sono stati individuati due meccanismi di polarizzazione molecolare che agiscono in maniera concertata: uno esteso all'intero volume della molecola d'acqua, l'altro localizzato in prossimità dei due doppietti elettronici dell'ossigeno.

Un altro aspetto importante della ricerca teorica riguarda lo sviluppo di metodi per il calcolo di superfici di energia libera tramite simulazioni Monte Carlo e di dinamica molecolare. Nel metodo denominato "Self-Healing Umbrella Sampling"[59], il tradizionale approccio cosiddetto "Umbrella Sampling", ideato originariamente per campionare lo spazio configurazionale di un sistema con simulazioni di equilibrio, è stato modificato introducendo un potenziale di campionamento "history-dependent", ossia dipendente dall'evoluzione temporale del sistema. Il metodo è quindi intrinsecamente di non equilibrio. Il potenziale di campionamento varia in modo autoconsistente fino a raggiungere una fase di convergenza in cui esso viene a coincidere, a meno del segno, con l'energia libera del sistema lungo la coordinata di reazione scelta.

Inerentemente agli aspetti teorici relativi alla determinazione di superfici di energia libera, è stato sviluppato un algoritmo per il campionamento non-Boltzmaniano dello spazio delle fasi[33, 34, 38]. Questa metodologia affronta la problematica del superamento di barriere di energia libera in modo analogo al noto metodo di simulazione di "replica exchange". Questo è realizzato tramite dinamiche in insiemi generalizzati in cui il sistema simulato è libero di muoversi attraverso stati termodinamici in cui la ipersuperficie di energia potenziale viene sostanzialmente appiattita. In correlazione con questo tipo di metodologie è stato formulato un nuovo metodo per intensificare la velocità di round-trip in simulazioni a scambio di repliche[25].

A partire dal 2006 la ricerca è stata indirizzata verso lo studio di metodi teorici nell'ambito della meccanica statistica di non equilibrio[17, 21, 24, 26, 28, 29, 31, 37, 39, 40, 18, 41, 43, 44, 48, 49, 53, 55, 57, 58]. I recenti teoremi di fluttuazione sulle dinamiche di non equilibrio hanno aperto una via nuova alla determinazione di differenze di energia libera tramite il calcolo o la misura del lavoro effettuato su un sistema in una collezione di trasformazioni dissipative. La relazione che lega queste due grandezze, cioè energia libera e lavoro dissipato, nota come teorema delle fluttuazioni transienti di Crooks (G. E. Crooks, J. Stat. Phys. 90, 1481, 1998), è stata dimostrata teoricamente e verificata numericamente nell'ambito di simulazioni di dinamica molecolare non Hamiltoniana a volume e temperatura costanti[58]. La dimostrazione è stata successivamente estesa ad un sistema in condizioni di pressione e temperatura costanti[57]. In due lavori successivi, il teorema delle fluttuazioni transienti di Crooks e la correlata uguaglianza di Jarzynski (C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. 78, 2690, 1997) sono stati generalizzati a trasformazioni che implicano variazioni arbitrarie delle condizioni termodinamiche del sistema[44, 53, 55]. Nella pubblicazione [49] è stato poi proposto un metodo per il calcolo di profili di energia libera basato su argomenti di massima probabilità a partire da medie su traiettorie di non equilibrio. Il metodo proposto si presenta come un'estensione del noto approccio di Bennett (C. H. Bennett, J. Comput. Phys. 22, 245, 1976) per la stima di differenze di energia libera fra due stati termodinamici. In stretta correlazione con quest'ultimo studio[49], è stato successivamente sviluppato un estimatore per il calcolo di potenziali di forza media derivato dal metodo di Bennett e dall'uguaglianza di Jarzynski[43]. Un'interessante estensione di questi metodi di non equilibrio ad un contesto di modelli diffusivi è presentata nella pubblicazione [48]. Nell'ambito delle simulazioni computazionali di non equilibrio, è stato sviluppato un algoritmo per l'ottimizzazione dell'efficienza delle simulazioni forzate sfruttando il congelamento dinamico[41] (simulazioni di dinamica molecolare) e configurazionale[31, 37] (simulazioni Monte Carlo) del sistema con lo scopo di limitare il campionamento dello spazio delle fasi a regioni dove la dissipazione è supposta essere localizzata.

Uno studio pilota riguardante lo sviluppo di strategie di parametrizzazione di campi di forza è stato realizzato con l'ausilio dell'analisi delle strutture a gabbia nel benzene liquido[66]. La struttura istantanea della gabbia è identificata con la struttura di minimo inerente di una molecola ottenuta mantenendo bloccate le posizioni degli atomi di tutte le altre molecole del sistema. È stato possibile così determinare e parametrizzare un potenziale di confinamento molecolare. Questo potenziale è identificato con la differenza di energia di interazione del sistema "molecola-intorno" nella configurazione di gabbia e nella configurazione istantanea. Questa ricerca, più che sugli aspetti specificatamente correlati alla dinamica del sistema in oggetto, è rivolta all'esplorazione di paradigmi per la parametrizzazione di potenziali efficaci in cui sia possibile separare la dinamica rotazionale e traslazionale di un sistema.

## Altre Attività Scientifiche e di Ricerca

2002 Contratto con l'Università degli Studi di Firenze per il reperimento di fonti storiche riguardanti la Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali per la realizzazione di un saggio, pubblicato nel 2005, sulla storia dell'Ateneo fiorentino: *L'Universita' degli Studi di Firenze 1924-2004*.

2003 Contratto con il Dipartimento di Energetica dell'Università degli Studi di Firenze per ricerche su un modello fisico-matematico capace di descrivere il processo di deposizione di materiale solido sulle pareti interne di tubi in cui scorrono fluidi in regime turbolento. La ricerca è stata condotta in collaborazione con l'associazione Onlus I2T3 (Industrial Innovation Through Technological Transfer) di Firenze ed il Settore Ricerche di ENI Tecnologie.

2004 Contratto con l'International Consortium for Advanced Design dell'Università degli Studi di Firenze per sviluppare la versione parallela di un programma per simulazioni di fluidodinamica.

Membro del team di sviluppatori di ORAC, un programma per simulazioni di dinamica molecolare classica, attualmente mantenuto presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (www.chim.unifi.it/orac).

Membro del team di sviluppatori di SIBFA, un programma per calcoli di meccanica molecolare con campi di forza polarizzabili, mantenuto dal gruppo di ricerca del Dott. Nohad Gresh del Laboratoire de Chimie et Biochimie Pharmacologiques et Toxicologiques dell'Università Paris Descartes, Parigi, Francia.

Attività gestionali 2009 - 2012 Membro del gruppo di lavoro per la gestione del sito Internet del Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze.

## Conoscenze Linguistiche

Inglese scritto (4/5) e parlato (4/5).

Francese scritto (3/5) e parlato (3/5).

## Attività Editoriale e di Revisione di Progetti Scientifici

Revisore per la valutazione dei programmi e prodotti di ricerca ministeriale (PRIN, FIRB, SIR).

Revisore per la valutazione dei progetti di ricerca nell'ambito del programma Italian SuperComputing Resource Allocation (ISCRA) del Consorzio Interuniversitario CINECA.

2015 - 2019 Membro del Comitato Editoriale della rivista "International Journal of Computational and Theoretical Chemistry" (Science Publishing Group; www.sciencepublishinggroup.com).

2012 - Oggi Membro del Comitato Editoriale della rivista "Journal of Chemistry", sezione "Theoretical Chemistry" (Hindawi Publishing Corporation; indicizzata ISI nel 2015 con fattore d'impatto 0.996; www.hindawi.com/journals/chem).

2013 - Oggi Membro del Comitato Editoriale della rivista "Journal of Theoretical and Computational Science" (OMICS Publishing Group; www.omicsonline.org/jtcohome.php).

2019 - Oggi Membro del Comitato Editoriale della rivista "Molecules" (MDPI; https://www.mdpi.com/journal/molecules).

Autore di 2 editoriali[23, 30] per la rivista Journal of Theoretical and Computational Science.

Revisore per le seguenti riviste scientifiche internazionali:

- American Journal of Physical Chemistry
- Biochemistry
- Biophysical Journal
- Carbohydrate Research
- Chemical Physics
- Journal of Chemistry
- International Journal of Molecular Sciences
- Journal of Chemical Physics
- Journal of Chemical Theory and Computation
- Journal of Computational Chemistry
- Journal of Molecular Graphics and Modelling
- Chemical Physics Letters
- Molecular Simulation
- Molecules
- Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics
- Journal of Molecular Modeling
- Journal of Physical Chemistry A
- Journal of Physical Chemistry B
- Journal of the American Chemical Society
- Journal of Theoretical and Computational Science
- Letters in Drug Design & Discovery
- Nature Communications
- Physical Chemistry Chemical Physics
- Physics Letters A
- Journal of Computational and Applied Mathematics
- Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering
- PLOS ONE
- European Biophysical Journal

## Partecipazione ad Istituti di Ricerca Nazionali ed Internazionali di Alta Qualificazione

1997 - Oggi European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy, Sesto Fiorentino, Italy (www.lens.unifi.it).

2015 - Oggi Istituto ICCOM CNR di Sesto Fiorentino nell'ambito del progetto "Catalisi ed elettrocatalisi per la produzione sostenibile di energia e la trasformazione di risorse rinnovabili".

## Tipologie di Finanziamento e Risorse per l'Attività Scientifica

Finanziamenti ∗ PRIN. ∗ FIRB. ∗ Contributo per la ricerca dell'Università degli Studi di Firenze (ex 60%). ∗ Contributo per la ricerca dell'European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy (Sesto Fiorentino, Firenze). ∗ "Progetto Giovani Ricercatori" dell'Università degli Studi di Firenze. ∗ Progetto ISCRA B 2013-2014 (NONION): Nonequilibrium trajectories for ion extrusion. ∗ Progetto ISCRA C 2014-2015 (OPNRNA): The role of ions in protein-RNA interactions. ∗ Progetto ISCRA C 2015-2016 (BIONICS) Ions in biomolecular interactions. ∗ Progetto Regione Toscana "Gioielli in Argento Da Galvanica, Ecologica e Tecnologica". ∗ Responsabilità scientifica per Borsisti e Dottorandi: borsa di studio Marie Curie (Dott. Dusan Račko, Bratislava, Slovacchia); borsa di studio con convenzione Italia-India (Dott.ssa Longjam Geeta Devi, Manipur, India); borsa di ricerca (Dott. Edoardo Giovannelli); borse di studio di Ateneo per Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (Dott. Paolo Nicolini e Edoardo Giovannelli).

Risorse di calcolo locali Cluster di 15 calcolatori situato presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Firenze. Cluster di 10 calcolatori situato presso l'European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy (LENS), Sesto Fiorentino (Firenze).

## Riconoscimenti per l'Attività Scientifica

2000 Menzione speciale della Commissione designata dal Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Fisica della Società Chimica Italiana (C. Corvaja, U. Mazzucato e J. Tomasi) per l'assegnazione del Primo Premio Semerano: "... La Commissione giudica degni di particolare menzione anche i lavori (*Electrical response in chemical potential equalization schemes*; Rif. [95]) di Riccardo Chelli (Università di Firenze) per gli spunti critici ed innovativi del suo lavoro teorico sul ruolo degli effetti di polarizzazione sulle distribuzioni di carica ...".

2001 Nomina a Cultore della Materia per il settore scientifico disciplinare CHIM/02 (Chimica Fisica) all'Università degli Studi di Firenze.

2006 Premio per il miglior poster al XXII Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana. Titolo Poster: *Structure and bonding of water molecules in the polar region of phospholipid membranes investigated by two-dimensional IR spectroscopy and MD simulation*.

2008 Rif. [46]: Articolo selezionato dall'Editore per la pubblicazione su Highlights in Chemical Biology: Research Articles (RSC), numero 6, 2008.

2008 Rif. [48]: Articolo selezionato dall'Editore per la pubblicazione su Virtual Journal of Biological Physics Research (AIP & APS), vol. 15, 15 Aprile 2008.

2006 Rif. [58]: Articolo selezionato dall'Editore per la pubblicazione su Virtual Journal of Biological Physics Research (AIP & APS), vol. 12, 1 Novembre 2006.

2005 Rif. [68]: Articolo selezionato dall'Editore per la pubblicazione su Virtual Journal of Biological Physics Research (AIP & APS), vol. 10, 15 Luglio 2005.

2014 Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato nel settore concorsuale O3/A2 "Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche".

2014 Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Associato nel settore concorsuale O2/B2 "Fisica Teorica della Materia".

2017 Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Ordinario nel settore concorsuale O3/A2 "Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche".

2017 Abilitazione Scientifica Nazionale per il ruolo di Professore Ordinario nel settore concorsuale O2/B2 "Fisica Teorica della Materia".

## Attività Didattica

INSEGNAMENTI UNIVERSITARI IN AFFIDAMENTO

2009, 2015 - Oggi Insegnamento di "Chimica Teorica" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (6 CFU) dell'Università degli Studi di Firenze.

2011 - Oggi Insegnamento di "Materiali Ceramici e Vetro" del Corso di Laurea in Chimica (6 CFU) dell'Università degli Studi di Firenze.

2012 - Oggi Insegnamento di "Chimica Computazionale" del Corso di Laurea in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche (6 CFU) dell'Università degli Studi di Firenze.

2019 - Oggi Insegnamento di "Solidi Molecolari: Struttura, Dinamica e Spettroscopie Ottiche e NMR" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (6 CFU) dell'Università degli Studi di Firenze.

DIDATTICA UNIVERSITARIA RETRIBUITA

1996 Tutore per l'insegnamento di "Chimica dell'ambiente I" del Diploma Universitario in Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof. Vincenzo Schettino).

2001 - 2007 Tutore per l'insegnamento di "Abilità Informatiche in Chimica" dei Corsi di Laurea in Chimica e in Chimica Applicata dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof. Giovanni Domenico Aloisi).

2001 - 2002 Tutore per l'insegnamento di "Conoscenze informatiche" del Corso di Laurea in Tecnologie per la Conservazione ed il Restauro dei Beni Culturali dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: 2001 Prof. Emilio Castellucci, 2002 Prof.ssa Maria Grazia Gasparo).

2002 Codocente per l'insegnamento di "Calcolo Numerico" del Corso di Laurea in Ingegneria Civile dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof.ssa Maria Macconi).

2002 Codocente per l'insegnamento di "Calcolo numerico" del Corso di Laurea in Ingegneria Ambientale dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof.ssa Maria Macconi).

DIDATTICA UNIVERSITARIA INTEGRATIVA

2017 Corso di "Computational Methods in Chemistry" per la Scuola di dottorato in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Firenze.

Tutore o coordinatore scientifico per laureandi e dottorandi.

Esercitatore per l'insegnamento "Elementi di Termodinamica Biochimica e Proprietà Molecolari" del Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Dott.ssa Cristina Gellini).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Abilità Informatiche in Chimica" del Corso di Laurea Triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Dott. Giovanni Domenico Aloisi).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Modellistica Chimica e Dinamica Molecolare" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof. Gianni Cardini).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Chimica Fisica I e Laboratorio di Chimica Fisica I" (modulo "Chimica Fisica I") del Corso di Laurea Triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof. Gianni Cardini).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Chimica Fisica Superiore" del Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof. Piero Procacci).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Chimica Fisica" del Corso di Laurea Magistrale in Chimica e Tecnologie Farmaceutiche dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Prof.ssa Giulietta Smulevich).

Membro della commissione d'esame per l'insegnamento "Elementi di Termodinamica Biochimica e Proprietà Molecolari" del Corso di Laurea Triennale in Biotecnologie dell'Università degli Studi di Firenze (docente titolare: Dott.ssa Cristina Gellini).

Membro di commissioni valutatrici per la discussione finale di tesi di Laurea Triennali in Chimica e Magistrali in Scienze Chimiche dell'Università degli Studi di Firenze.

Membro di commissioni valutatrici per il passaggio di anno per il Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche.

ATTIVITÀ DI DIVULGAZIONE SCIENTIFICA

2005 - 2006 Coordinatore ed Operatore per il progetto OPENLAB organizzato dalla Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali dell'Università degli Studi di Firenze e finalizzato alla divulgazione scientifica per scuole Materne, Elementari, Medie Inferiori e Medie Superiori.

2006 Supporto didattico per la "XVI Settimana della Cultura Scientifica" finalizzata alla divulgazione scientifica ed organizzata nell'ambito del progetto OPENLAB dall'Università degli Studi di Firenze.

2006 Lezioni per il corso di aggiornamento sull'insegnamento della Chimica: "Le frontiere della chimica", rivolto agli insegnanti degli istituti di istruzione superiore, secondo il Protocollo di Intesa: Università degli Studi di Firenze - USR Toscana - Confindustria Toscana, per l'attuazione del Progetto Nazionale "Lauree Scientifiche" - Orientamento e formazione insegnanti in area Chimica. Titolo del modulo: "Struttura e reattività: le basi della chimica".

## Lista delle Pubblicazioni (gli asterischi indicano Chelli come referente della ricerca)


[1] M. Innocenti, A. Giaccherini, R. Chelli, S. Martinuzzi, W. Giurlani, M. Passaponti, A. Lavacchi, C. Fontanesi
Modelling of the elementary steps involved in the Aluminum electrochemical deposition from ionic liquid based solution: the BMImCl/$AlCl_3$ system
*Journal of the Electrochemical Society* 2020, 167 n. 013525.

[2] V. V. Volkov, R. Chelli, R. Righini, C. C. Perry
Indigo chromophores and pigments: Structure and dynamics
*Dyes and Pigments* 2020, 172 n. 107761.

[3] F. Nuti, C. Gellini, M. Larregola, L. Squillantini, R. Chelli, P. R. Salvi, O. Lequin, G. Pietraperzia, A. M. Papini
A photochromic azobenzene peptidomimetic of a beta-turn model peptide structure as a conformational switch
*Frontiers in Chemistry* 2019, 7 n. 180.

[4] M. Pagliai, G. Funghi, D. Vassetti, P. Procacci, R. Chelli, G. Cardini
Imidazole in aqueous solution: hydrogen bond interactions and structural reorganization with concentration
*The Journal of Physical Chemistry B* 2019, 123 p. 4055–4064.

[5] L. Briccolani-Bandini, A. Brandi, G. Cardini, R. Chelli, F. M. Cordero, C. Gellini, M. Pagliai
Computational investigation of the selective cleavage of diastereotopic cyclopropane bonds in 5-Spirocyclopropane isoxazolidines rearrangement
*The Journal of Organic Chemistry* 2019, 84 p. 6757–6764.

[6] * E. Giovannelli, C. Gellini, G. Pietraperzia, G. Cardini, P. Procacci, M. Pagliai, V. Volkov, R. Chelli
Correspondence between light-absorption spectrum and nonequilibrium work distribution as a mean to access free energy differences between electronic states
*The Journal of Chemical Physics* 2018, 149 n. 084101.

[7] G. La Penna, R. Chelli
Structural insights into the osteopontin-aptamer complex by molecular dynamics simulations
*Frontiers in Chemistry* 2018, 6 n. 2.

[8] * E. Giovannelli, M. Cioni, P. Procacci, G. Cardini, M. Pagliai, V. Volkov, R. Chelli
Binding free energies of host-guest systems by nonequilibrium alchemical simulations with constrained dynamics: Illustrative calculations and numerical validation
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2017, 13 p. 5887–5899.

[9] * E. Giovannelli, P. Procacci, G. Cardini, M. Pagliai, V. Volkov, R. Chelli
Binding free energies of host-guest systems by nonequilibrium alchemical simulations with constrained dynamics: Theoretical framework
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2017, 13 p. 5874–5886.

[10] C. Caratelli, R. Cammi, R. Chelli, M. Pagliai, G. Cardini, V. Schettino
Insights on the realgar crystal under pressure from XP-PCM and periodic model calculations
*The Journal of Physical Chemistry A* 2017, 121 p. 8825–8834.

[11] L. Moroni, M. Pagliai, R. Chelli, G. Pietraperzia, P. R. Salvi, C. Gellini
Photochemical reactivity of 1,6-methano[20]annulene
*The Journal of Physical Chemistry A* 2017, 121 p. 4412–4421.

[12] P. Procacci, R. Chelli
Statistical mechanics of ligand-receptor noncovalent association, revisited: Binding site and standard state volumes in modern alchemical theories
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2017, 13 p. 1924–1933.

[13] * E. Giovannelli, G. Cardini, V. Volkov, R. Chelli
Nonequilibrium work theorems applied to transitions between configurational domains
*Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2016, 123204 p. 1–23.

[14] V. Volkov, R. Chelli
Resolving capacity of infrared–visible sum frequency generation microscopy to address discrete structural realizations of a protein at interface
*Journal of Raman Spectroscopy* 2016, 47 p. 828–838.

[15] F. Nerattini, R. Chelli, P. Procacci
II. Dissociation free energies in drug–receptor systems via nonequilibrium alchemical simulations: application to the FK506-related immunophilin ligands
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2016, 18 p. 15005–15018.

[16] * E. Giovannelli, G. Cardini, R. Chelli
Elastic barrier dynamical freezing in free energy calculations: a way to speed up nonequilibrium molecular dynamics simulations by orders of magnitude
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2016, 12 p. 1029–1039.

[17] * E. Giovannelli, G. Cardini, R. Chelli
Simulations in generalized ensembles through noninstantaneous switches
*Physical Review E* 2015, 92 n. 043310.

[18] * R. Chelli, G. Cardini, E. Giovannelli, G. F. Signorini, P. Procacci
Implementations of nonequilibrium methods for free energy calculations: forthcoming developments of the ORAC molecular dynamics simulation code
*VIRT&L-COMM* 2015, 7 n. 7.

[19] * E. Giovannelli, G. Cardini, C. Gellini, G. Pietraperzia, R. Chelli
Computing free energy differences of configurational basins
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2015, 11 p. 3561–3571.

[20] V. Volkov, R. Chelli
Polarization entanglement of sum-frequency photons: A tool to probe the markovian limit
*Physical Review A* 2015, 91 n. 063831.

[21] * E. Giovannelli, G. Cardini, C. Gellini, G. Pietraperzia, R. Chelli
Annealed importance sampling with constant cooling rate
*The Journal of Chemical Physics* 2015, 142 n. 074102.

[22] R. Chelli, G. Pietraperzia, A. Bencini, C. Giorgi, V. Lippolis, P. R. Salvi, C. Gellini
A fluorescent receptor for halide recognition: clues for the design of anion chemosensors
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2015, 17 p. 10813–10822.

[23] * R. Chelli
About a world where second law of thermodynamics can be violated
*Journal of Theoretical and Computational Science* 2014, 1 n. e107.

[24] * E. Giovannelli, C. Gellini, G. Pietraperzia, G. Cardini, R. Chelli
Nonequilibrium candidate Monte Carlo simulations with configurational freezing schemes
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2014, 10 p. 4273–4283.

[25] * G. F. Signorini, E. Giovannelli, Y. G. Spill, M. Nilges, R. Chelli
Convective replica-exchange in ergodic regimes
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2014, 10 p. 953–958.

[26] * E. Giovannelli, C. Gellini, G. Pietraperzia, G. Cardini, R. Chelli
Combining path-breaking with bidirectional nonequilibrium simulations to improve efficiency in free energy calculations
*The Journal of Chemical Physics* 2014, 140 n. 064104.

[27] * S. Puccioni, C. Bazzicalupi, A. Bencini, C. Giorgi, B. Valtancoli, G. De Filippo, V. Lippolis, P. R. Salvi, G. Pietraperzia, R. Chelli, C. Gellini
Tuning the emission properties of fluorescent ligands by changing pH: the unusual case of an acridine-containing polyamine macrocycle
*The Journal of Physical Chemistry A* 2013, 117 p. 3798–3008.

[28] * P. Nicolini, D. Frezzato, C. Gellini, M. Bizzarri, R. Chelli
Toward quantitative estimates of binding affinities for protein-ligand systems involving large inhibitor compounds: a steered molecular dynamics simulation route
*Journal of Computational Chemistry* 2013, 34 p. 1561–1576.

[29] * R. Chelli, C. Gellini, G. Pietraperzia, E. Giovannelli, G. Cardini
Path-breaking schemes for nonequilibrium free energy calculations
*The Journal of Chemical Physics* 2013, 138 n. 214109.

[30] * R. Chelli
Journal of Theoretical and Computational Science: Open Access, A bridge to link knowledge from chemistry, physics, biology and more
*Journal of Theoretical and Computational Science* 2013, 1 n. e102.

[31] * R. Chelli
Local sampling in steered Monte Carlo simulations decreases dissipation and enhances free energy estimates via nonequilibrium work theorems
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2012, 8 p. 4040–4052.

[32] A. Paarmann, M. Lima, R. Chelli, R. Righini, D. Miller
Excitonic effects in the 2DIR spectra of liquid formamide

*in Research in Optical Sciences, OSA Technical Digest (Optical Society of America)* 2012, paper IW3D.2.

[33] * R. Chelli, G. F. Signorini
Serial generalized ensemble simulations of biomolecules with self-consistent determination of weights (erratum)
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2012, 8 p. 2552–2552.

[34] * R. Chelli, G. F. Signorini
Serial generalized ensemble simulations of biomolecules with self-consistent determination of weights
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2012, 8 p. 830–842.

[35] A. Paarmann, M. Lima, R. Chelli, V. V. Volkov, R. Righini, R. J. D. Miller
Excitonic effects in two-dimensional vibrational spectra of liquid formamide
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2011, 13 p. 11351–11358.

[36] V. V. Volkov, R. Chelli, F. Muniz-Miranda, R. Righini
Structural properties of a membrane associated anchor dipeptide
*The Journal of Physical Chemistry B* 2011, 115 p. 5294–5303.

[37] * P. Nicolini, D. Frezzato, R. Chelli
Exploiting configurational freezing in nonequilibrium Monte Carlo simulations
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2011, 7 p. 582–593.

[38] * R. Chelli
Optimal weights in serial generalized-ensemble simulations
*Journal of Chemical Theory and Computation* 2010, 6 p. 1935–1950.

[39] * P. Nicolini, P. Procacci, R. Chelli
Hummer and Szabo-like potential of mean force estimator for bidirectional nonequilibrium pulling experiments/simulations
*The Journal of Physical Chemistry B* 2010, 114 p. 9546–9554.

[40] S. Marsili, G. F. Signorini, R. Chelli, M. Marchi, P. Procacci
ORAC: a molecular dynamics simulation program to explore free energy surfaces in biomolecular systems at the atomistic level
*Journal of Computational Chemistry* 2010, 31 p. 1106–1116.

[41] * P. Nicolini, R. Chelli
Improving fast-switching free energy estimates by dynamical freezing
*Physical Review E* 2009, 80 n. 041124.

[42] M. Lima, R. Chelli, V. V. Volkov, R. Righini
Two-dimensional infrared spectroscopy of a structured liquid: neat formamide
*The Journal of Chemical Physics* 2009, 130 n. 204518.

[43] * R. Chelli, P. Procacci
A potential of mean force estimator based on nonequilibrium work exponential averages
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2009, 11 p. 1152–1158.

[44] * R. Chelli
Nonequilibrium work relations for systems subject to mechanical and thermal changes
*The Journal of Chemical Physics* 2009, 130 n. 054102.

[45] V. Bambagioni, D. Bani, A. Bencini, T. Biver, M. Cantore, R. Chelli, L. Cinci, P. Failli, L. Ghezzi, C. Giorgi, S. Nappini, F. Secco, M. R. Tinè, B. Valtancoli, M. Venturini
Polyamine-polycarboxylate metal complexes with different biological effectiveness as nitric oxide scavengers. Clues for drug design
*Journal of Medicinal Chemistry* 2008, 51 p. 3250–3260.

[46] S. Marsili, R. Chelli, V. Schettino, P. Procacci
Thermodynamics of stacking interactions in proteins
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2008, 10 p. 2673–2685.

[47] * R. Chelli, V. V. Volkov, R. Righini
Retrieval of spectral and dynamic properties from two-dimensional infrared pump-probe experiments
*Journal of Computational Chemistry* 2008, 29 p. 1507–1516.

[48] C. P. Calderon, R. Chelli
Approximating nonequilibrium processes using a collection of surrogate diffusion models
*The Journal of Chemical Physics* 2008, 128 n. 145103.

[49] * R. Chelli, S. Marsili, P. Procacci
Calculation of the potential of mean force from nonequilibrium measurements via maximum likelihood estimators
*Physical Review E* 2008, 77 n. 031104.

[50] G. Nannucci, L. Moroni, C. Gellini, R. Chelli, P. R. Salvi, V. Schettino, G. Dellepiane
Fluorescence emissions and torsional conformations in $\pi$-conjugated chains of PolyDCHD-HS
*The Journal of Physical Chemistry C* 2007, 111 p. 17485–17492.

[51] V. V. Volkov, R. Chelli, W. Zhuang, F. Nuti, Y. Takaoka, A. M. Papini, S. Mukamel, R. Righini
Electrostatic interactions in phospholipid membranes revealed by coherent 2D IR spectroscopy
*Proceedings of the National Academy of Sciences of the United Staes of America* 2007, 104 p. 15323–15327.

[52] J.-P. Piquemal, R. Chelli, P. Procacci, N. Gresh
Key role of the polarization anisotropy of water in modeling classical polarizable force fields
*The Journal of Physical Chemistry A* 2007, 111 p. 8170–8176.

[53] * R. Chelli, S. Marsili, A. Barducci, P. Procacci
Numerical verification of the generalized Crooks nonequilibrium work theorem for non-Hamiltonian molecular dynamics simulations
*The Journal of Chemical Physics* 2007, 127 n. 034110.

[54] * D. Račko, R. Chelli, G. Cardini, S. Califano, J. Bartoš
Free volume from molecular dynamics simulations and its relationships to the positron annihilation lifetime spectroscopy
*Theoretical Chemistry Accounts* 2007, 118 p. 443–448.

[55] * R. Chelli, S. Marsili, A. Barducci, P. Procacci
Generalization of the Jarzynski and Crooks nonequilibrium work theorems in molecular dynamics simulations
*Physical Review E* 2007, 75 n. 050101(R).

[56] V. Schettino, R. Chelli, S. Marsili, A. Barducci, C. Faralli, M. Pagliai, P. Procacci, G. Cardini
Problems in molecular dynamics of condensed phases
*Theoretical Chemistry Accounts* 2007, 117 p. 1105–1120.

[57] * R. Chelli, S. Marsili, A. Barducci, P. Procacci
Recovering the Crooks equation for dynamical systems in the isothermal-isobaric ensemble: a strategy based on the equations of motion
*The Journal of Chemical Physics* 2007, 126 n. 044502.

[58] P. Procacci, S. Marsili, A. Barducci, G. F. Signorini, R. Chelli
Crooks equation for steered molecular dynamics using a Nosé-Hoover thermostat
*The Journal of Chemical Physics* 2006, 125 n. 164101.

[59] S. Marsili, A. Barducci, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino
Self-healing umbrella sampling: a non equilibrium approach for quantitative free energy calculations
*The Journal of Physical Chemistry B* 2006, 110 p. 14011–14013.

[60] V. V. Volkov, F. Nuti, Y. Takaoka, R. Chelli, A. M. Papini, R. Righini
Hydration and hydrogen bonding of carbonyls in dimyristoyl-phosphatidylcholine bilayer
*Journal of the American Chemical Society* 2006, 128 p. 9466–9471.

[61] * R. Chelli, P. Procacci
Comment on "From Subtle to Substantial: Role of Metal Ions on $\pi$-$\pi$ Interactions"
*The Journal of Physical Chemistry B* 2006, 110 p. 10204–10205.

[62] A. Barducci, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino, F. L. Gervasio, M. Parrinello
Metadynamics simulation of prion protein: $\beta$-structure stability and the early stages of misfolding
*Journal of the American Chemical Society* 2006, 128 p. 2705–2710.

[63] V. V. Volkov, R. Chelli, R. Righini
Domain formation in lipid bilayers probed by two-dimensional infrared spectroscopy
*The Journal of Physical Chemistry B* 2006, 110 p. 1499–1501.

[64] * R. Chelli, A. Barducci, L. Bellucci, V. Schettino, P. Procacci
Behavior of polarizable models in presence of strong electric fields. I. Origin of nonlinear effects in water-point charge systems
*The Journal of Chemical Physics* 2005, 123 n. 194109.

[65] M. Paolantoni, R. Chelli, M. Ricci, P. Foggi
Proceedings of the "XI TRVS International Conference": Time Resolved Vibrational Spectroscopy, edito da Salvatore Califano, Paolo Foggi e Roberto Righini.
*The ultrafast dynamics of liquid 1-octanol measured by femtosecond optical Kerr effect* 2005, p. 211–216.

[66] A. Magro, D. Frezzato, A. Polimeno, G. J. Moro, R. Chelli, R. Righini
Dynamics of liquid benzene: a cage analysis
*The Journal of Chemical Physics* 2005, 123 n. 124511.

[67] * R. Chelli, R. Righini, S. Califano
Structure of liquid formic acid investigated by first principle and classical molecular dynamics simulations
*The Journal of Physical Chemistry B* 2005, 109 p. 17006–17013.

[68] * R. Chelli, V. Schettino, P. Procacci
Comparing polarizable force fields to ab initio calculations reveals nonclassical effects in condensed phases
*The Journal of Chemical Physics* 2005, 122 n. 234107.

[69] * A. Barducci, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino
Misfolding pathways of the prion protein probed by molecular dynamics simulations
*Biophysical Journal* 2005, 88 p. 1334–1343.

[70] * R. Chelli, M. Pagliai, P. Procacci, G. Cardini, V. Schettino
Polarization response of water and methanol investigated by a polarizable force field and density functional theory calculations: implications for charge transfer
*The Journal of Chemical Physics* 2005, 122 n. 074504.

[71] * D. Račko, R. Chelli, G. Cardini, J. Bartoš, S. Califano
Insights into positron annihilation lifetime spectroscopy by molecular dynamics simulations. Free-volume calculations for liquid and glassy glycerol
*European Physical Journal D* 2005, 32 p. 289–297.

[72] * R. Chelli, P. Procacci
Comment to "Calculation of the Dipole Moment for Polypeptides Using the Generalized Born-Electronegativity Equalization Method: Results in Vacuum and Continuum-Dielectric Solvent"
*The Journal of Physical Chemistry B* 2004, 108 p. 16995–16997.

[73] G. Pietraperzia, R. Chelli, M. Becucci, A. Riganelli, M. Alberti, A. Laganà
Molecular mechanics and dynamics calculations to bridge molecular structure information and spectroscopic measurements on complexes of aromatic compounds
*Lecture Notes in Computer Science* 2004, 3044 p. 374–382.

[74] * G. F. Signorini, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino
Energetic fitness of histidine protonation states in PDB structures
*The Journal of Physical Chemistry B* 2004, 108 p. 12252–12257.

[75] M. Becucci, G. Pietraperzia, M. Pasquini, G. Piani, A. Zoppi, R. Chelli, E. Castellucci, W. Demtroeder
A study on the anisole-water complex by molecular beam-electronic spectroscopy and molecular mechanics calculations
*The Journal of Chemical Physics* 2004, 120 p. 5601–5607.

[76] A. S. Gemechu, L. J. H. Hoffmann, S. Marquardt, C. G. Eisenhardt, H. Baumgärtel, R. Chelli, G. Cardini, S. Califano
The absorption spectrum of anisole and the anisole/$CO_2$ 1:1-cluster. The influence of intermolecular interaction on intramolecular vibrations
*Zeitschrift für Physikalische Chemie: International journal of research in physical chemistry and chemical physics* 2004, 218 p. 123–153.

[77] * R. Chelli, F. L. Gervasio, P. Procacci, V. Schettino
Inter-residue and solvent-residue interactions in proteins: a statistical study on experimental structures
*Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics* 2004, 55 p. 139–151.

[78] * R. Chelli, G. Cardini, P. Procacci, R. Righini, S. Califano
Proceedings of the "XII UPS Conference": Recent Advances in Ultrafast Spectroscopy, edito da Salvatore Califano, Paolo Foggi e Roberto Righini.
*Dynamics and structure of liquid and supercooled liquid m-toluidine investigated by molecular dynamics simulations* 2003, p. 57–67.

[79] R. Chelli, G. Cardini, P. Procacci, R. Righini, S. Califano
Dynamical and structural correlation in supercooled liquids: a molecular dynamics investigation of m-toluidine
*The Journal of Chemical Physics* 2003, 119 p. 357–363.

[80] * R. Chelli, P. Procacci
Comment on "Classical polarizable force fields parametrized from ab initio calculations" [J. Chem. Phys. 117, 1416 (2002)]
*The Journal of Chemical Physics* 2003, 118 p. 1571–1572.

[81] R. Chelli, P. Procacci
A transferable polarizable electrostatic force field for molecular mechanics based on the chemical potential equalization principle
*The Journal of Chemical Physics* 2002, 117 p. 9175–9189.

[82] F. L. Gervasio, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino
The nature of intermolecular interactions between aromatic amino acid residues
*Proteins: Structure, Function, and Genetics* 2002, 48 p. 117–125.

[83] R. Chelli, F. L. Gervasio, P. Procacci, V. Schettino
Stacking and T-shape competition in aromatic-aromatic amino acid interactions
*Journal of the American Chemical Society* 2002, 124 p. 6133–6143.

[84] R. Chelli, G. Cardini, P. Procacci, R. Righini, S. Califano
Molecular dynamics of glass-forming liquids: structure and dynamics of liquid metatoluidine
*The Journal of Chemical Physics* 2002, 116 p. 6205–6215.

[85] F. L. Gervasio, R. Chelli, P. Procacci, V. Schettino
Is the T-shaped toluene dimer a stable intermolecular complex?
*The Journal of Physical Chemistry A* 2002, 106 p. 2945–2948.

[86] R. Chelli, R. Righini, S. Califano, P. Procacci
Towards a polarizable force field for molecular liquids
*Journal of Molecular Liquids* 2002, 96-97 p. 87–100.

[87] C. G. Eisenhardt, A. S. Gemechu, H. Baumgärtel, R. Chelli, G. Cardini, S. Califano
Excited state photoelectron spectroscopy of anisole
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2001, 3 p. 5358–5368.

[88] F. L. Gervasio, R. Chelli, M. Marchi, P. Procacci, V. Schettino
Determination of the potential of mean force of aromatic amino acid complexes in various

solvents using molecular dynamics simulations: The case of the tryptophan-histidine pair
*The Journal of Physical Chemistry B* 2001, 105 p. 7835–7846.

[89] R. Chelli, G. Cardini, M. Ricci, P. Bartolini, R. Righini, S. Califano
The fast dynamics of benzene in the liquid phase. Part II: A molecular dynamics simulation
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2001, 3 p. 2803–2810.

[90] M. Ricci, P. Bartolini, R. Chelli, G. Cardini, S. Califano, R. Righini
The fast dynamics of benzene in the liquid phase. Part I: Optical Kerr effect experimental investigation
*Physical Chemistry Chemical Physics* 2001, 3 p. 2795–2802.

[91] R. Chelli, G. Cardini, P. Procacci, R. Righini, S. Califano, A. Albrecht
Simulated structure, dynamics, and vibrational spectra of liquid benzene
*The Journal of Chemical Physics* 2000, 113 p. 6851–6863.

[92] R. Chelli, F. L. Gervasio, C. Gellini, P. Procacci, G. Cardini, V. Schettino
Conformational distribution of gas-phase glycerol
*The Journal of Physical Chemistry A* 2000, 104 p. 11220–11222.

[93] R. Chelli, F. L. Gervasio, C. Gellini, P. Procacci, G. Cardini, V. Schettino
Density functional calculation of structural and vibrational properties of glycerol
*The Journal of Physical Chemistry A* 2000, 104 p. 5351–5357.

[94] * R. Chelli, S. Ciabatti, G. Cardini, R. Righini, P. Procacci
Erratum: "Calculation of optical spectra in liquid methanol using molecular dynamics and the chemical potential equalization method" [J. Chem. Phys. 111, 4218, (1999)]
*The Journal of Chemical Physics* 2000, 112 p. 5515–5515.

[95] * R. Chelli, P. Procacci, R. Righini, S. Califano
Electrical response in chemical potential equalization schemes
*The Journal of Chemical Physics* 1999, 111 p. 8569–8575.

[96] * R. Chelli, S. Ciabatti, G. Cardini, R. Righini, P. Procacci
Calculation of optical spectra in liquid methanol using molecular dynamics and the chemical potential equalization method
*The Journal of Chemical Physics* 1999, 111 p. 4218–4229.

[97] R. Chelli, P. Procacci, G. Cardini, S. Califano
Glycerol condensed phases. Part II. A molecular dynamics study of the conformational structure and hydrogen bonding
*Physical Chemistry Chemical Physics* 1999, 1 p. 879–885.

[98] * R. Chelli, P. Procacci, G. Cardini, R. G. Della Valle, S. Califano
Glycerol condensed phases. Part I. A molecular dynamics study
*Physical Chemistry Chemical Physics* 1999, 1 p. 871–877.

[99] R. Chelli, G. Cardini, S. Califano
Calculation of elastic coherent neutron scattering spectra from molecular dynamics data: the NaCN plastic crystal
*Chemical Physics Letters* 1997, 274 p. 335–340.

[100] R. Chelli, G. Cardini, S. Califano
A molecular dynamics study of translation-rotation coupling in the NaCN plastic crystal
*The Journal of Chemical Physics* 1997, 107 p. 8041–8050.

Firenze, 12 Novembre 2019