

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato in tenure track (RTT) per il gruppo scientifico-disciplinare 05/BIOS-07 - BIOCHIMICA, settore scientifico-disciplinare BIO-07/A - Biochimica presso il Dipartimento di BIOTECNOLOGIE MEDICHE E MEDICINA TRASLAZIONALE, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 76 del 20/09/2024) Codice concorso 5629

Alessio Bartocci
CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	BARTOCCI
NOME	ALESSIO

TITOLI

TITOLO DI STUDIO

(indicare la Laurea conseguita inserendo tipologia e relativo punteggio, Ateneo, titolo della tesi, data di conseguimento, ecc.)

Laurea Magistrale in LM-54 Scienze chimiche, 110/110 con lode, Università degli Studi di Perugia, Titolo della tesi: Forze Intermolecolari non covalenti in sistemi contententi molecole idrogenate ed alogenate da esperimenti collisionali, conseguita il 19/07/2012

TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire tipologia del titolo e relativo punteggio, Ateneo, titolo della tesi, data di conseguimento, ecc.)

Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche, Università degli Studi di Perugia, Titolo della Tesi: "Characterization of the weak hydrogen and halogen bonds by molecular beam scattering experiments and ab-initio calculations", conseguito il 03/12/2015, sotto la supervisione del Professor Fernando Pirani. Il progetto prevedeva lo studio di interazioni non covalenti come il legame idrogeno ed alogeno in fase gassosa, attraverso la combinazione di esperimenti di scattering collisionale, e rigorosi calcoli "ab-initio". Il mio contributo al progetto prevedeva sia la partecipazione agli esperimenti, in cui un fascio di atomi/molecole veniva fatto interagire con un gas target (atomi o molecole), e le cui collisioni venivano rivelate da uno spettroscopio.

trometro di massa, che all'analisi successiva dei dati. In parallelo, mi occupavo di ottenere risultati da calcoli "ab-initio", e di confrontarli direttamente con i dati sperimentali.

CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

(per ciascun contratto stipulato, inserire tipologia, università/ente, durata in anni / data di inizio e fine, ecc.)

Assegno di ricerca, Università degli Studi di Trento, Dipartimento di Fisica, Titolo: "Simulazioni in dinamica molecolare di proteine e recettori di membrana", in totale 2 anni, dal 01/06/2023 in corso (scadenza il 31/05/2025), sotto la supervisione del Professor Gianluca Lattanzi.

Contratto di ricerca post-dottorato, Università di Strasburgo, Francia, Titolo: "Simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse-grained di recettori sinaptici e modulatori allosterici", 1 anno e 6 mesi, dal 01/02/2021 al 30/09/2022, sotto la supervisione del Professor Marco Cecchini.

Contratto di ricerca post-dottorato, Scuola Normale Superiore di Lione (ENS de Lyon), Francia, Titolo: "MD investigations of non-covalent interactions ruling out crystallophores association to proteins", 2 anni e 1 mese, dal 01/01/2019 al 31/01/2021, sotto la supervisione della Professoressa Elise Dumont.

Assegno di ricerca post-dottorato, Università degli Studi di Genova, Dipartimento di Fisica, Titolo: "Simulazioni di dinamica molecolare atomistiche e coarse-grained di sistemi formati da nanoparticelle cariche e membrane lipidiche", 2 anni e 3 mesi, dal 03/10/2016 al 01/01/2019, sotto la supervisione della Professoressa Giulia Rossi.

ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

(inserire tipologia dell'attività, periodo [gg/mm/aa inizio e fine], anno accademico, ateneo, denominazione del corso, numero ore/CFU, ecc.)

Supporto alla didattica, dal 18/09/2024 al 21/02/2025, aa 2024/2025, Università degli Studi di Trento, titolo del corso: "Computational Biophysics - Computer Simulations of Biomolecules", Laurea Magistrale in Biologia Quantitativa e Computazionale, 40 ore di tipo A (16 ore già effettuate). Il ruolo consiste, in presenza del titolare del corso, di offrire supporto per lo svolgimento e per lezioni frontali del modulo di laboratorio.

Insegnamento per il corso di Dottorato in Fisica, dal 27/03/2024 al 29/05/2024, aa 2023/2024, Università degli Studi di Trento, titolo del corso: "MM-DG - Molecular modeling, design and graphics", 24 ore (3 CFU). Il corso si occupava di dare le basi della modellizzazione molecolare computazionale, partendo da teoria di chimica quantistica "ab-initio" fino alla descrizione di campi di forze classici (atomistici e a grana grossa) per la dinamica molecolare di biomolecole. Come argomenti principali del corso sono stati trattati i sistemi biologici, formati da macromolecole come proteine, dna, lipidi, per caratterizzare la loro interazione e la formazione di strutture supramolecolari complesse.

Insegnamento, dal 29/11/2022 al 07/12/2022, aa 2022/2023, Università di Strasburgo (Francia), Dipartimento di Chimica, titolo del corso: "Modélisation - Introduction (Molecular modelling)" (Introduzione alla Modellizzazione Molecolare), 12 ore. Il corso si proponeva di dare le basi della modellizzazione molecolare computazionale, utilizzando dinamica molecolare classica a scala atomistica per descrivere il comportamento di peptidi come il dipeptide alanina.

Attività di tutorato, aa 2014/2015, Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, titolo del corso: "Chimica Generale ed Inorganica per Chimica", 30 ore.

Attività di tutorato, aa 2013/2014, Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, titolo del corso: "Chimica Generale ed Inorganica per Chimica", 30 ore.

Attività di tutorato, aa 2013/2014, Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, titolo del corso: "Chimica Generale ed Inorganica per Biologia", 18 ore.

Attività di tutorato, aa 2012/2013, Università degli Studi di Perugia, Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, titolo del corso: "Fisica 2 per Chimica", 30 ore.

DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI

(inserire tipologia dell'attività, anno/anno accademico, ente, periodo, impegno in termini orari, ecc.)

Assegno di ricerca post-dottorato in biofisica computazionale, dal 01/06/2023 in corso, Università degli studi di Trento, Dipartimento di Fisica, tempo pieno. La mia ricerca verte sullo studio dei cambiamenti conformazionali di attinoporine, piccole proteine che riescono ad provocare la formazione di pori in membrane lipidiche, attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica a risoluzione atomistica e a grana grossa (coarse-grained), per caratterizzarne i meccanismi biofisici e molecolari principali. In particolare, la mia attenzione si focalizza anche sui meccanismi biofisici molecolari, come le interazioni proteina-proteina, che portano diversi monomeri all'aggregazione supramolecolare in strutture più complesse (tetrameri, ottameri).

Attività di post-dottorato in biochimica/biologia strutturale computazionale, dal 01/02/2021 al 30/09/2022, Università di Strasburgo, Francia, Dipartimento di Chimica, tempo pieno. La mia ricerca verteva sullo studio dell'interazione supramolecolare tra modulatori allosterici e recettori sinaptici, come il recettore glicinic, attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica a risoluzione atomistica e a grana grossa (coarse-grained), per caratterizzare i meccanismi biofisici e biochimici alla base. Particolare attenzione è stata anche dedicata alla scrittura di un codice di analisi delle simulazioni che permettesse l'individuazione delle principali regioni della proteina in cui i ligandi interagivano maggiormente.

Attività di post-dottorato in biochimica computazionale, 01/01/2019 al 31/01/2021, Scuola Normale Superiore di Lione (ENS de Lyon), Francia, Dipartimento di Chimica, tempo pieno. La mia ricerca verteva sullo studio dell'interazione supramolecolare tra proteine solubili e complessi di metalli (lantanidi), attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica a risoluzione atomistica. Questa classe di ligandi è molto utilizzata per applicazioni biochimiche/biofisiche come la co-cristallizzazione di proteine e il bio-imaging.

Assegno di ricerca post-dottorato in biofisica computazionale, 03/10/2016 al 01/01/2019, Università degli studi di Genova, Dipartimento di Fisica, tempo pieno. La mia ricerca verteva sullo studio delle interazioni tra nanoparticelle, funzionalizzate e cariche negativamente, e membrane lipidiche, attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica a risoluzione atomistica e a grana grossa. Tali strutture supramolecolari risultano avere una vasta applicabilità biomedica, dalla veicolazione di farmaci o macromolecole più complesse come RNA e DNA, al bioimaging, fino alla terapia fotodinamica dei tumori.

DOCUMENTATA ATTIVITÀ IN CAMPO CLINICO

(indicare, data, durata, ruolo, ente presso il quale si è prestata attività assistenziale, ecc.)

--

REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

(indicare descrizione dell'attività, durata, eventuale ente a favore del quale è stata realizzata l'attività, ecc.)

Progetto computazionale di classe C (ISCRA-C) al centro di Supercomputing italiano Cineca, da Gennaio 2024 a Novembre 2024, titolo: "Simulations of the interaction between ligands-membrane/soluble proteins and the subsequent allosteric pathways", per un totale di 10000 ore di calcolo GPU. I principali argomenti investigati sono stati la comprensione di meccanismi biofisici molecolari alla base dell'interazione tra ligandi-proteine, e proteina-proteina, attraverso approcci computazionali come la dinamica molecolare.

Progetto computazionale al centro di Supercomputing dell'Università di Strasburgo (Francia), da Giugno 2021 a Giugno 2022, titolo: "Computational design of glycine receptor allosteric modulators". L'attenzione principale è stata posta sull'interazione tra modulatori allosterici e recettore glicinico, attraverso simulazioni di dinamica molecolare.

Progetto computazionale di classe C (ISCRA-C) al centro di Supercomputing italiano Cineca, da Maggio 2017 a febbraio 2018, titolo: "Molecular Dynamics (MD) simulations of charged nanoparticle-biomembrane systems", per un totale di 80000 ore di calcolo CPU. Particolare enfasi è stata data sulla comprensione dell'interazione supramolecolare tra nanoparticelle cariche e membrane lipidiche attraverso simulazioni di dinamica molecolare.

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

(per ciascuna voce inserire tipologia di progetto, titolo del progetto, anno, durata, eventuale ente finanziatore e importo del finanziamento, ruolo, gruppo di ricerca, ecc.)

Progetto di collaborazione scientifica in corso con i Professori Alessandro Casnati e Francesco Sansone, dell'Università degli studi di Parma, Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale, e la Professoressa Giorgia Oliviero, Università degli Studi di Napoli Federico II, Dipartimento di Medicina Molecolare e Biotecnologie Mediche, e il Professore Nicola Borbone, Università degli Studi di Napoli Federico II, Dipartimento di Farmacia, per caratterizzare, attraverso tecniche sperimentali (dicroismo circolare, NMR) e simulazioni di dinamica molecolare atomistica classica, le interazioni tra macrocicli (calixareni) e quadruplex di guanina. Il mio ruolo risulta essere il referente/coordinatore per la modellizzazione computazionale del sistema.

Progetto di collaborazione scientifica in corso con il Professore Francesco Musiani dell'Università degli studi di Bologna, Dipartimento di Farmacia e Biotecnologie, per caratterizzare attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica a grana grossa, la dinamica conformazionale del "complesso respiratorio I" (pubblicazione n°2 nella sezione Pubblicazioni scientifiche), e metalloproteine contenenti complessi metallici, attraverso modellizzazione a livello ab-initio e dinamica molecolare classica atomistica. Il mio ruolo è risultato essere di collaboratore per la modellizzazione molecolare del sistema a grana grossa, mentre risulta di coordinatore per la modellizzazione a livello ab-initio.

Progetto di collaborazione scientifica in corso con la Professoressa Elise Dumont dell'Università Costa Azzurra (Université Côte d'Azur) di Nizza (Francia), Dipartimento di Chimica, per caratterizzare attraverso simulazioni di dinamica molecolare classica atomistica le interazioni tra calixareni e proteine solubili come il citocromo C (pubblicazione n°3, 4 e 5 nella sezione Pubblicazioni scientifiche), dove il mio ruolo risulta essere quello di coordinatore principale dello studio, e la dinamica conformazionale di DNA funzionalizzato con complessi metallici di iridio, dove ricopro il ruolo di collaboratore per la modellizzazione molecolare del sistema.

TITOLARITÀ DI BREVETTI

(per ciascun brevetto, inserire autori, titolo, tipologia [nazionale o internazionale], anno, numero brevetto, ecc.)

--

ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

(inserire titolo congresso/convegno, data, durata in giorni/ore, ente organizzatore, ecc.)

BIOPHYS2024, 11-13 Settembre 2024, Firenze, comunicazione orale dal titolo "Supramolecular protein-ligand systems: insights from molecular dynamics simulations", organizzato dal gruppo BIOPHYS dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN).

8th Workshop of "Physics of Biomolecules: Structure, Dynamics, and Function", 5-8 febbraio 2024, Bressanone, comunicazione orale dal titolo "Cannabinoid binding at the glycine receptor $\alpha 1$: insights from a multi-scale resolution computational approach", organizzato dall'Università degli Studi di Padova e dall'Università degli Studi di Milano.

VIII Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale - DCTC2023, 20-22 settembre 2023, Pisa, comunicazione orale dal titolo "A multiscale approach to decipher allosteric cannabinoid binding at the glycine receptor $\alpha 1$ ", organizzato dalla divisione di "Chimica Teorica e Computazionale" della Società Chimica Italiana.

Congresso della Divisione di Sistemi Biologici - DCSB2023, 27-29 settembre 2023, Milano, comunicazione orale dal titolo "A multiscale approach to decipher allosteric cannabinoid binding at the glycine receptor $\alpha 1$ ", organizzato dalla divisione di "Chimica dei Sistemi Biologici" della Società Chimica Italiana.

VII Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale - DCTC2022, 21-23 settembre 2022, Modena, comunicazione orale dal titolo "Capturing the recognition dynamics of p-sulfonato-calix[4]arenes by cytochrome c: towards a quantitative free energy assessment", organizzato dalla divisione di "Chimica Teorica e Computazionale" della Società Chimica Italiana.

GGMM-SFCi (Group of Graphism and Molecular Modeling-French Society of Chemoinformatics), 29 settembre-1 ottobre 2021, Lille (Francia), comunicazione orale dal titolo "Identification of allosteric modulatory sites in the Glycine receptor by coarse-grained and atomistic Molecular Dynamics simulations", organizzato dal "Group of Graphism and Molecular Modeling" e "French Society of Chemoinformatics".

18th Merck and Elsevier Young Chemists Symposium, 12-16 novembre 2018, Rimini, comunicazione orale dal titolo "Interactions between Negatively Charged Nanoparticles and Phospholipid Bilayers: Insights from Molecular Dynamics Simulations", organizzato dalla Società Chimica Italiana Giovani.

XXXIV Convegno delle Sezioni Toscana, Umbria, Marche e Abruzzo (TUMA), 23-25 settembre 2015, Perugia, comunicazione orale dal titolo "Halogen and hydrogen bond: a direct focus on their nature", organizzato dalla Società Chimica Italiana - Sezioni Toscana, Umbria, Marche e Abruzzo.

CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA

(inserire nome e motivazione del premio, data, ente erogatore, ecc.)

--

POSSESSO DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE EUROPEA RICONOSCIUTO DA BOARD INTERNAZIONALI (relativamente a quei settori concorsuali nei quali è prevista)

(indicare ambito di conseguimento del diploma, data di conseguimento, ente che ha rilasciato il diploma, ecc.)

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

(indicare se contratto di tipologia A o B, Ateneo, data di decorrenza e fine contratto/periodo/durata in anni, ecc.)

PRODUZIONE SCIENTIFICA

PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

(per ciascuna pubblicazione indicare: nomi degli autori, titolo completo, casa editrice, data e luogo di pubblicazione, codice ISBN, ISSN, DOI o altro equivalente)

1. Bartocci A., Grazzi M., Awad N., Corringer PJ, Souza PCT. and Cecchini M., "A millisecond coarse-grained simulation approach to decipher the allosteric cannabinoid-binding site(s) in the glycine receptor $\alpha 1$ ", Springer Nature, Nat. Commun., 15, 9040, 2024, doi.org/10.1038/s41467-024-53098-4
2. Rigobello L., Lugli F., Caporali L., Bartocci A., Fadanni J., Zerbetto F., Iommarini L., Carelli V., Ghelli AM and Musiani F., "A computational study to assess the pathogenicity of single or combinations of missense variants on respiratory Complex I", Elsevier, International Journal of Biological Macromolecules, 273, 133086, 2024, doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.133086 .
3. Bartocci A. * and Dumont E., "Situating the Phosphonated Calixarene-Cytochrome C Association by Molecular Dynamics Simulations", AIP Publishing, The Journal of Chemical Physics, 160, 105101, 2024, doi.org/10.1063/5.0198522 .
4. Dos Santos K., Bartocci A., Gillet, N., Denis-Quanquin S., Roux, A., Lin, E., Xu, Z., Finizola, R., Chedozeau, P., Chen, X., Caradeuc, C., Baudin, M., Bertho, G., Riobé, F., Maury, O., Dumont E. and Giraud N., "One touch is all it takes: the supramolecular interaction between ubiquitin and lanthanide complexes revisited by paramagnetic NMR and molecular dynamics", Royal Society of Chemistry, PCCP, 26, 14573, 2024, doi.org/10.1039/d4-cp00463a .
5. Bartocci A. * and Dumont E., "Probing the dynamical interaction of para-sulfonato-calix[4]arene with a small antifungal protein", Royal Society of Chemistry, PCCP, 25, 18067, 2023, doi.org/10.1039/d3cp01202f .
6. Bartocci A.*, Pereira G., Cecchini M. and Dumont E., "Capturing the Recognition Dynamics of *para*-Sulfonato-calix[4]arenes by Cytochrome c: Toward a Quantitative Free Energy Assessment", American Chemical Society, JCI, 62, 6739, 2022, doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00483 .
7. Kjølbbye L.R, Pereira G.P., Bartocci A.,... and Paulo C. T. Souza, "Towards design of drugs and delivery systems with Martini coarse-grained models", Cambridge University Press, QRB Discovery, 3, E19, 2022, doi.org/10.1017/qrd.2022.16 .
8. Roux A., Talon Romain, Alsaman Z., Engilberge S., D'Aléo A., Di Pietro S., Robin A., Bartocci A., Pilet G., Dumont E., Wagner T., Shima S., Riobé F., Girard E. and Maury O., "In-

- fluence of divalent cations in the protein crystallization process assisted by Lanthanide-based additives", American Chemical Society, Inorganic Chemistry, 60, 15208, 2021, doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c01635 .
9. Gillet N., Bartocci A. and Dumont E., "Assessing the sequence dependence of pyrimidine-pyrimidone (6-4) photoproduct in a duplex double-stranded DNA: A pitfall for microsecond range simulation", AIP Publishing, The Journal of Chemical Physics, 154, 135103, 2021, doi.org/10.1063/5.0041332 .
 10. Denis-Quanquin S., Bartocci A., Szczepaniak F., Riobé F., Maury O., Dumont E. and Giraud N., "Capturing the dynamic association between a tris-dipicolinate lanthanide complex and a decapeptide: a combined paramagnetic NMR and molecular dynamics exploration", Royal Society of Chemistry, PCCP, 23, 11224, 2021, doi.org/10.1039/D0CP06570F .
 11. Bartocci A., Gillet N., Szczepaniak F., Jiang T. and Dumont E., "Molecular Dynamics Approach for Capturing Calixarene-Protein Interactions: The Case of Cytochrome C", American Chemical Society, The Journal of Physical Chemistry B, 124, 11371, 2020, doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c08482 .
 12. Rossi G., Salassi S., Simonelli F., Bartocci A. and Monticelli L., "Nanoparticle-Membrane Interactions: Surface Effects", Book Chapter of "Biomembrane Simulations: Computational Studies of Biological Membranes", 163-176, 2019, doi.org/10.1201/9781351060318 .
 13. Salassi S., Simonelli F., Bartocci A. and Rossi G., "A Martini coarse-grained model of the calcein fluorescent dye", IOP Publishing, Journal of Physics D: Applied Physics, 51, 384002, 2018, doi.org/10.1088/1361-6463/aad4b8 .
 14. Cappelletti D., Aquilanti V., Bartocci A., Nunzi F., Tarantelli F., Belpassi L. and Pirani F., "Interaction of O₂ with CH₄, CF₄, and CCl₄ by Molecular Beam Scattering Experiments and Theoretical Calculations", American Chemical Society, The Journal of Physical Chemistry A, 120, 5197, 2016, doi.org/10.1021/acs.jpca.6b00948 .
 15. Falcinelli S., Bartocci A., Cavalli S., Pirani F. and Vecchiocattivi F., "Stereodynamics in Collisional Autoionization of Water, Ammonia and Hydrogen Sulphide Driven by the Competitive Role of Intermolecular Halogen and Hydrogen Bonds", Chemistry-A European Journal, 22, 764, 2016, doi.org/10.1002/chem.201503692 .
 16. Bartocci A.*, Frati F., Roncaratti L.F., Cappelletti D., Tarantelli F., Belpassi L. and Pirani F., "An Ab-Initio Electronic Density Study of the CH₄-Ar, CH₄-Xe, CH₄-H₂O and CH₄-H₂S Complexes: insights into the Nature of the Intermolecular Interaction", Molecular Physics, 113, 3992, 2015, doi.org/10.1080/00268976.2015.1100344 .
 17. Falcinelli S., Bartocci A., Cavalli S., Pirani F. and Vecchiocattivi F., "The Stereodynamics in Collisional Autoionization of Ammonia by Helium and Neon Metastable Excited Atoms through Molecular Beam Experiments", AIP Publishing, The Journal of Chemical Physics, 143, 164306, 2015, 10.1063/1.4933429 .
 18. Bartocci A., Belpassi L., Cappelletti D., Falcinelli S., Grandinetti F., Tarantelli F. and Pirani F., "Catching the Role of Anisotropic Electronic Distribution and Charge Transfer in Halogen Bonded Complexes of Noble Gases", AIP Publishing, The Journal of Chemical Physics, 142, 184304, 2015, doi.org/10.1063/1.4919692 .
 19. Cappelletti D., Bartocci A., Grandinetti F., Falcinelli S., Belpassi L., Tarantelli F. and Pirani F., "Experimental Evidence of Chemical Components in the Bonding of Helium and Neon with Neutral Molecules", Chemistry-A European Journal, 21, 6234-6240, 2015, doi.org/10.1002/chem.201406103 .
 20. Cappelletti D., Bartocci A., Frati F., Roncaratti L.F., Belpassi L., Tarantelli F., Aiswaryalakshmi P., Arunan E. and Pirani F., "H₂O-CH₄ and H₂S-CH₄ Complexes: a Direct Comparison through Molecular Beam Experiments and Ab-Initio Calculations", Royal Society of Chemistry, PCCP, 17, 30613, 2015, doi.org/10.1039/C5CP03704B .
 21. Falcinelli S., Bartocci A., Candori P., Pirani F. and Vecchiocattivi F., "Intermolecular Potential Energy Surfaces for the Interaction between H₂X (X=O,S) and a Metastable Ne*(3P₂;0) Atom", Chemical Physics Letters, 614, 171-175, 2014, doi.org/10.1016/j.cplett.2014.09.017 .
 22. Bartocci A., Cappelletti D., Pirani F., Tarantelli F. and Belpassi L., "Intermolecular Interaction in the H₂S-H₂ Complex: Molecular Beam Scattering Experiments and Ab-Initio Cal-

culations", American Chemical Society, The Journal of Physical Chemistry A, 118, 6440-6450, 2014, doi.org/10.1021/jp502170g .

23. Falcinelli S., Rosi M., Candori P., Vecchiocattivi F., Bartocci A., Lombardi A., Lago N.F. and Pirani F., "Modeling the Intermolecular Interactions and Characterization of the Dynamics of Collisional Autoionization Processes", In Computational Science and Its Applications (ICCSA)-Springer Berlin Heidelberg, 69-83, 2013, doi.org/10.1007/978-3-642-39637-3_6 .

24. Balucani N., Bartocci A., Brunetti B., Candori P., Falcinelli S., Palazzetti F., Pirani F. and Vecchiocattivi F., "Collisional Autoionization Dynamics of Ne*(3P2;0)-H2O", Chemical Physics Letters, 546, 34-39, 2012, doi.org/10.1016/j.cplett.2012.07.051

Data

19/10/2024

Luogo

Trento