

Relazione dell'Attività Didattica ed Attività e Scientifica

della Prof. Cecilia Coletti

nel biennio 1 Novembre 2023 - 31 Ottobre 2025

CHIETI, Febbraio 2026

Attività Scientifica

L'attività scientifica della Prof. Cecilia Coletti è principalmente diretta verso l'investigazione teorica della struttura elettronica e della dinamica nucleare a partire da sistemi modello, attraverso sistemi di crescente complessità, fino a macromolecole di interesse applicativo, biologico e farmaceutico. Si presenta una breve illustrazione dei principali argomenti di ricerca affrontati dalla Prof. Coletti nel biennio considerato. Una parte della ricerca della Prof. Coletti si è concentrata sull'investigazione della struttura elettronica, del legame, della reattività, delle proprietà spettroscopiche, delle proprietà di trasporto di composti contenenti metalli di interesse biologico e farmaceutico, con metodi teorici multi-livello che spaziano da metodi altamente correlati come metodi MP2 o CCSD(T), a metodi basati sulla teoria del funzionale di densità (DFT), a metodi ibridi QM/MM o di dinamica molecolare.

Nel dettaglio sono stati considerati complessi metallici di interesse dal punto di vista farmacologico nella terapia oncologica, soprattutto composti a base di oro [6,8]. Sono stati condotti calcoli di supporto (basati sia su tecniche DFT che su tecniche altamente correlate, come MP2) per l'interpretazione di spettri IRMPD (Infrared Multiple Photon Dissociation) sulle reazioni di tali complessi con target molecolari [8]. La tecnica IRMPD, all'avanguardia per la caratterizzazione delle proprietà strutturali di ioni in fase gassosa, necessita infatti di un forte supporto computazionale per l'interpretazione degli spettri IR ottenuti. Questo lavoro è stato condotto in collaborazione con il gruppo di ricerca della Prof. Crestoni dell'Università "la Sapienza" di Roma. I calcoli sono stati utili per chiarire alcuni risultati ottenuti con tecniche di ionizzazione electrospray accoppiate alla spettrometria di massa. Inoltre, sono stati anche considerati nuovi sviluppi teorici e metodologici per le investigazioni dell'interazioni di tali composti con DNA G-quadruplex [6]. In questa linea di ricerca trovano anche spazio i lavori condotti per la caratterizzazione di composti metallici dinucleari a base di cobalto con attività di rilascio di monossido di carbonio [7] con prospettive di applicazione come antitumorali e per la delucidazione computazionale di nuovi meccanismi per l'inibizione di anidrasi carboniche e la messa a punto di nuovi composti con tali proprietà [3].

Un'altra linea di ricerca si concentra sullo sviluppo e sull'uso di metodi misti quanto-classici per la descrizione della dinamica nucleare state-selected di collisioni inelastiche atomo-diatomo e diatomo-diatomo [1,2,10,11]. La conoscenza dei coefficienti di velocità di tali reazioni è fondamentale per modellare le atmosfere terrestri e dei pianeti, gli spazi interstellari, plasmi, e reazioni di combustione e, ad alta temperatura, per modellare il rientro di navicelle spaziali nell'atmosfera. In questi studi la Prof. Coletti ha collaborato con il Prof. Pirani dell'Università di Perugia, il dr. Bartolomei del CSIC di Madrid, con il gruppo del Prof. Sun dell'Istituto di Meccanica dell'Accademia delle Scienze Cinese di Pechino e con il Prof. Li dell'Università di Chongqing (Cina). In dettaglio sono state studiate le collisioni: N_2-N_2 , N_2-O_2 , $CO-CO$ e N_2-O . Nell'ambito della chimica delle atmosfere terrestri e planetarie, e della composizione ed evoluzione dei mezzi interstellari sono state sviluppate, sempre in collaborazione con il Prof. Pirani, le superfici

di energia potenziale per l'ossido di propilene (prima molecola chirale rilevata negli spazi interstellari) con atomi di gas nobili [9].

L'attività scientifica del biennio Novembre 2023-Ottobre 2025 è documentata da 11 pubblicazioni su riviste internazionali, e da comunicazioni a congressi nazionali ed internazionali, di cui 3 su invito, come riportato sotto. E' stata inoltre invitata come Visiting Scientist, presso l'Istituto di Fisica Fundamental del CSIC a Madrid (Spagna) dal 8 al 12 luglio 2024.

Dal 1/09/2024 al 30/11/2025 ha partecipato al progetto PaGUSci , Parallelizzazione e Porting su GPU di Codici Scientifici , finanziato da INAF, tramite Bando a cascata HPC spoke 3, su fondi PNRR.

E' membro dell'Editorial Board delle riviste *Molecules* e *Physchem*, entrambe MDPI e di *Frontiers in Materials*. E' inoltre peer reviewer per numerose riviste internazionali. E' stata editor dei volumi 91 e 92 della rivista *Advances in Quantum Chemistry*, edita da Elsevier, di cui ha anche scritto le Prefazioni [4,5].

E' membro del panel di esperti nel dominio CMST (Chemistry and Molecular Sciences and Technologies) per le azioni europee COST (European Cooperation in Science and Technology).

E' membro dei comitati scientifici internazionali per le conferenze internazionali *Molecular Electronic Structure* e *South European Conference on the Science of Molecules*.

Ha organizzato l'edizione 2024 (la settima edizione) della conferenza *Molecular Electronic Structure 2024* che si è tenuta a Francavilla al Mare dal 21 al 25 Settembre 2024 che ha visto la partecipazione di oltre 100 scienziati da tutto il mondo. Ha inoltre organizzato il workshop internazionale *Quantum Chemistry and Cheminformatics* all'Accademia Nazionale dei Lincei a Roma nei giorni 26 e 27 Settembre 2024.

Nel biennio considerato è stata nelle commissioni di valutazione o rapporteur per Tesi di PhD in Spagna e Francia.

Publicazioni Scientifiche nel Biennio 1 Novembre 2023 -31 Ottobre 2025

1. Hong, Q., Bartolomei, M., Pirani, F., Sun, Q., Coletti, C.
The many faces of vibrational energy relaxation in $N_2(v) + O(^1D)$ collisions: Dynamics on $^1\Pi$ and $^1\Delta$ potential energy surfaces
(2025) Journal of Chemical Physics, 162 (11), art. no. 114308
DOI: 10.1063/5.0255380
2. Yang, J., Hong, Q., Bartolomei, M., Pirani, F., Coletti, C., Sun, Q., Li, J.
Quantum-classical rate coefficients for $O_2 + N_2$ inelastic collisions with very high vibrational levels
(2025) Physical Review A, 111 (3), art. no. 032804
DOI: 10.1103/PhysRevA.111.032804
3. Paciotti, R., Carradori, S., Angeli, A., D'Agostino, I., Ferraroni, M., Coletti, C., Supuran, C.T.
Unprecedented carbonic anhydrase inhibition mechanism: Targeting histidine 64 side chain through a halogen bond
(2025) Archiv der Pharmazie, 358 (1), art. no. e2400776
DOI: 10.1002/ardp.202400776
4. Coletti, C., Hoggan, P.
Preface
(2025) Advances in Quantum Chemistry, 92, pp. xv - xvii
DOI: 10.1016/S0065-3276(25)00078-4
5. Hoggan, P., Coletti, C.
Preface
(2025) Advances in Quantum Chemistry, 91, pp. xv - xvi
DOI: 10.1016/S0065-3276(25)00052-8
6. Paciotti, R., Storch, L., Re, N., Coletti, C.
Towards a quantum treatment of DNA G-quadruplex: The FMO method elucidates interactions with alkali metal ions
(2025) Advances in Quantum Chemistry, 91, pp. 251 - 268
DOI: 10.1016/bs.aiq.2025.03.006
7. Paciotti, R., Coletti, C., Berrino, E., Arrighi, F., Maccelli, A., Lasalvia, A., Crestoni, M.E., Secci, D., Carradori, S., Supuran, C.T., Carta, F.
Carbon Monoxide Release from Aryl-Propargyl Dicobalt(0)Hexacarbonyl Derivatives: A Computational and Experimental Study
(2024) International Journal of Molecular Sciences, 25 (21), art. no. 11644
DOI: 10.3390/ijms252111644
8. Paciotti, R., Corinti, D., Coletti, C., Re, N., Berden, G., Oomens, J., Fornarini, S., Crestoni, M.E.
Vibrational analysis of auranofin complexes with cysteine and selenocysteine unveils distinct binding motifs and specific unimolecular reactivity
(2024) Inorganic Chemistry Frontiers, 11 (23), pp. 8464 - 8478

DOI: 10.1039/d4qi02023e

9. Coletti, C., Palazzetti, F., Pirani, F.
Multidimensional potential energy surfaces for rare-gas - Propylene oxide systems
(2024) AIP Conference Proceedings, 3030 (1), art. no. 020003
DOI: 10.1063/5.0196710
10. Hong, Q., Storch, L., Coletti, C., Li, J., Sun, Q., Li, J.
Quantum-classical rate coefficient datasets of vibrational energy transfer in carbon monoxide based on highly accurate potential energy surface
(2024) Journal of Chemical Physics, 160 (8), art. no. 084305
DOI: 10.1063/5.0189772
11. Hong, Q., Storch, L., Sun, Q., Bartolomei, M., Pirani, F., Coletti, C.
Improved Quantum-Classical Treatment of N₂-N₂ Inelastic Collisions: Effect of the Potentials and Complete Rate Coefficient Data Sets
(2023) Journal of Chemical Theory and Computation, 19 (23), pp. 8557 - 8571
DOI: 10.1021/acs.jctc.3c01103

Comunicazioni a Congressi e Seminari su Invito nel biennio 1 Novembre 2023 -31 Ottobre 2025

1. Q. Hong, **C. Coletti**
“The many faces of vibrational relaxation dynamics in N₂+O collisions”
17th Quantum Reactive Scattering Workshop, 24-28 Giugno 2024, Istanbul (Turchia)
2. **C. Coletti**
“The vibrational relaxation dynamics in N₂-O collisions”
Mini-symposium, 10 Luglio 2024, Instituto de Física Fundamental, CSIC, Madrid (Spagna)
3. **C. Coletti**
“The mixed quantum-classical method for vibrational energy transfer in inelastic collisions”
2nd South European Conference on the Science of Molecules, 16-18 Settembre 2025, Madrid (Spagna)
4. L. Storch, **C. Coletti**
“Complete rate coefficient datasets for inelastic collisions by the mixed quantum-classical method and machine learning”
Artificial Intelligence for Molecular & Materials Systems, 8 Ottobre 2025, Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, Roma

Attività Didattica

La Prof. Coletti è stata docente dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica del Corso di Studi in Farmacia dell'Università "G. d'Annunzio" di Chieti-Pescara negli Anni Accademici 2023/2024, 2024/2025 e ha fatto parte, in qualità di presidente, della commissione di esami di profitto dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica del corso di Studi in Farmacia e, come membro, di quella dell'insegnamento di Chimica Generale ed Inorganica del corso di Studi in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.

Negli Anni Accademici 2023/2024 e 2024/2025 è stata docente del modulo di Chimica Generale e di Laboratorio di Chimica all'interno dell'insegnamento di Chimica nel Corso di Studi in Ingegneria Biomedica e ha fatto parte della commissione di esami di profitto di tale insegnamento.

La Prof. Coletti svolge costantemente attività di assistenza per gli studenti nella preparazione degli esami.

Dal 2025 è membro della Commissione Didattica per l'Erasmus Mundus Joint Master Degree (EMJMD) in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM):
<https://www.emtccm.org>.

Chieti, 10/02/2026

Cecilia Coletti

