



Cheng Giuseppe Chen

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

[11/2020 – Attuale]

Dottorando in Scienza Chimiche

Sapienza Università di Roma

Città: Roma

Paese: Italia

Campi di studio: Scienze naturali, matematiche e statistiche: *Chimica*

Tesi: Modellizzazione teorica e computazionale delle proprietà elettroniche di sistemi di interesse biologico in soluzione

- **Relatore:** Prof. Marco D'Abramo.

[01/2023 – 07/2023]

Ricercatore in visita

Università di Vienna

Città: Vienna

Paese: Austria

- **Argomento:** Estensione di un approccio ML/MM (machine learning/molecular mechanics) per la simulazione di sistemi molecolari multi-scale.
- Ricerca condotta presso il gruppo di Prof. Leticia González.

[2018 – 2020]

Laurea Magistrale in Chimica

Sapienza Università di Roma

Città: Rome

Paese: Italia

Campi di studio: Scienze naturali, matematiche e statistiche: *Chimica*

Voto finale: 110/110 e lode

Tesi: Modellizzazione delle proprietà elettroniche dell'alanina in soluzione

Relatore: Prof. Marco D'Abramo

Conseguita in data 24/07/2020

[2015 – 2018]

Laurea Triennale in Chimica

Sapienza Università di Roma

Città: Rome

Paese: Italia

Campi di studio: Scienze naturali, matematiche e statistiche: *Chimica*

Conseguita in data 26/07/2018

COMPETENZE TECNICHE

Conoscenza di programmi di Dinamica Molecolare (Gromacs, OpenMM)

Conoscenza di programmi di calcolo quanto-meccanici (Dalton, QChem, Gaussian, NWChem, Orca, TURBOMOLE)

Conoscenza dei linguaggi di programmazione Python3 e Fortran

Esperienza in simulazioni di dinamica non-adiabatica usando il programma SHARC

COMPETENZE LINGUISTICHE

Lingua madre: italiano

Altre lingue:

inglese

ASCOLTO C1 LETTURA C1 SCRITTURA B2

PRODUZIONE ORALE B2 INTERAZIONE ORALE B2

cinese

ASCOLTO B1 LETTURA B1 SCRITTURA B1

PRODUZIONE ORALE B1 INTERAZIONE ORALE B1

Livelli: A1 e A2: Livello elementare B1 e B2: Livello intermedio C1 e C2: Livello avanzato

PUBBLICAZIONI

[**A study of cyanidin/alginate complexation: Influence of pH in assembly and chiral properties**](#)

Chotechuang, N.; Di Gianvincenzo, P.; **Chen, C. G.**; Nardi, A. N.; Padro, D.; Boonla, C.; Ortore, M. G.; D' Abramo, M.; Moya, S. E. *Carbohydr. Polym.* **2023**, *315*, 120957.

[**Unveiling the Excited State Dynamics of Indole in Solution**](#)

Chen, C. G.; Giustini, M.; D' Abramo, M.; Amadei, A. *J. Chem. Theory Comput.* **2023**, *19*, 4114–4124

[**P1 Push-Pull Dye as a Case Study in QM/MM Theoretical Characterization for Dye-sensitized Solar Cell Organic Chromophores**](#)

D'Annibale, V.; **Chen, C. G.**; Bonomo, M.; Dini, D.; D' Abramo, M. *ChemistrySelect* **2023**, *8*, e202204904

[**A Simplified Treatment for Efficiently Modeling the Spectral Signal of Vibronic Transitions: Application to Aqueous Indole**](#)

Chen, C. G.; Aschi, M.; D' Abramo, M.; Amadei, A. *Molecules* **2022**, *27*(23), 8135.

[**PyMM: An Open-Source Python Program for QM/MM Simulations Based on the Perturbed Matrix Method**](#)

Chen, C. G.; Nardi, A. N.; Amadei, A.; D' Abramo, M. *J. Chem. Theory Comput.* **2023**, *19*, 33–41.

[**Bioderived, chiral and stable 1-dimensional light-responsive nanostructures: Interconversion between tubules and twisted ribbons.**](#)

Santilli, A.; Lapi, A.; Cautela, J.; D' Abramo, M.; **Chen, C. G.**; Del Giudice, A.; Sennato, S.; Belic, D.; Hugo Soto Tellini, V.; Schill'en, K.; di Gregorio, M. C.; Galantini, L. *J. Colloid Interface Sci.* **2022**, *623*, 723–734.

[**Complexation and organization of doxorubicin on polystyrene sulfonate chains: impacts on doxorubicin dimerization and quenching**](#)

Gjerde, N. S.; Nardi, A. N.; **Chen, C. G.**; Di Gianvincenzo, P.; D' Abramo, M.; Scipioni, A.; Galantini, L.; Moya, S. E.; Giustini, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 25990–25998

Absorption behavior of doxorubicin hydrochloride in visible region in different environments: a combined experimental and computational study

Chen, C. G.; Nardi, A. N.; Giustini, M.; D'Abramo, M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 12027–12035.

Computational Modeling of the Thermodynamics of the Mesophilic and Thermophilic Mutants of Trp-Cage Miniprotein

B'ò, L.; Milanetti, E.; Chen, C. G.; Ruocco, G.; Amadei, A.; D'Abramo, M. *ACS Omega* **2022**, *7*, 13448–13454.

Theoretical-computational modelling of the L-alanine CD spectrum in water

Chen, C. G.; Giustini, M.; Scipioni, A.; Amadei, A.; D'Abramo, M. *Comput. Theor. Chem.* **2022**, *1209*, 113591.

Point Mutations at a Key Site Alter the Cytochrome P450 OleP Structural Dynamics

Montemiglio, L. C.; Gugole, E.; Freda, I.; Exertier, C.; D'Auria, L.; Chen, C. G.; Nardi, A. N.; Cerutti, G.; Parisi, G.; D'Abramo, M.; Savino, C.; Vallone, B. *Biomolecules* **2022**, *12*.

Theoretical Modeling of Redox Potentials of Biomolecules

Chen, C. G.; Nardi, A. N.; Amadei, A.; D'Abramo, M. *Molecules* **2022**, *27*

CONFERENZE E SEMI-NARI

[27/08/2023 – 31/08/2023] **EuChemS CompChem 2023 "Exploring Molecular Space"** Salonicco, Grecia

Poster: Unveiling the Excited State Dynamics of Indole in Solution

[21/09/2022 – 23/09/2022]

VII Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale - DCTC2022

Modena

Presentazione orale: PyMM: An Open-Source Python Program for QM/MM Simulations Based on the Perturbed Matrix Method

[04/07/2022 – 07/07/2022] **XLVIII Congresso Nazionale di Chimica Fisica** Genova

Poster: Absorption behavior of doxorubicin hydrochloride in Visible region in different environments: a combined experimental and computational study

[20/06/2022 – 23/06/2022] **First Symposium for YouNg Chemists: Innovation and Sustainability** Roma

Presentazione orale: Absorption behavior of doxorubicin hydrochloride in Visible region in different environments: a combined experimental and computational study
