

Curriculum del
Dott. Patrizio Grimaldi

Settori di ricerca

- a) Calcoli di meccanica e dinamica molecolare
- b) Cinetiche chimiche non lineari
- c) Dinamica lagrangiana in forma implicita

Titoli di studio

Laurea in Chimica con lode

Laurea in Matematica con lode

Attività scientifica

Il dott. P. Grimaldi è nato a Napoli il 18 Febbraio 1959 .

Il 27 Ottobre 1983 ha conseguito la laurea in Chimica, con lode, presso l'Università di Napoli " Federico II " discutendo una tesi dal titolo :

“ Struttura cristallina ed analisi conformazionale di sequenze di dialchil-derivati della glicina”, svolta presso il gruppo Stato Solido, relatore il prof. C. Pedone, e presso il gruppo di Struttura e Dinamica Molecolare, relatore il prof. F. Lelj, del Dipartimento di Chimica della suddetta Università. Dal Novembre 1983 al Novembre 1984 ha lavorato presso i succitati gruppi come trattista. L'attività di ricerca svolta in questo periodo ha riguardato, essenzialmente, l'analisi conformazionale teorica di polipeptidi, con particolare riguardo a residui α,α -dialchilati e a peptidi a configurazione alternata L,D. Calcoli eseguiti con funzioni empiriche di interazione fra atomi non legati hanno permesso di mettere in evidenza una transizione dalla struttura elicoidale, favorita nel caso della dimetil-glicina, a strutture estese, nel caso di sostituenti alchilici più ingombranti (gruppi etilici, n-propilici, ecc.). Tale variazione è accompagnata da una sensibile riduzione dell'angolo $N-C_{\alpha}-C'$. Gli andamenti generali calcolati sono stati confermati da misure IR, NMR e di raggi X. I risultati ottenuti sono stati pubblicati .

L'11 Dicembre 1984 il dott. P. Grimaldi è stato assunto dalla F.O.S. (Fibre Ottiche Sud), società del gruppo Pirelli, in cui ha svolto il ruolo di responsabile sia del laboratorio di caratterizzazione chimico-fisico (DSC, TG, IR, HPLC) e reologico (INSTRON, RHEOMAT) delle resine termoindurenti fotoattivabili (utilizzate come rivestimento delle fibre ottiche) che dell'impianto pilota per la produzione di nuove preforme in vetri speciali con caratteristiche ottiche mirate . Per oltre un anno ha seguito settimanalmente un corso di specializzazione sulle tecniche di caratterizzazione delle materie plastiche presso il Dipartimento di Ingegneria dei materiali e della produzione dell'Università di Napoli, gruppo Polimeri, coordinato dal prof. Nicolais. In questo periodo ha anche svolto un ulteriore corso di specializzazione sull'uso delle tecniche calorimetriche presso i laboratori della Mettler di Milano . I risultati raggiunti durante il corso sono stati pubblicati .

Dal Settembre 1986 al Settembre 1987 ha lavorato, come trattista, con il prof. F. Lelj e con il prof. P. A. Temussi presso l'Università di Napoli . Il lavoro svolto ha riguardato calcoli di meccanica e dinamica molecolare nonché studio delle superfici di potenziale di peptidi oppioidi μ -selettivi complessati con etere-corona (18C6). I risultati ottenuti sono stati pubblicati .

Nel Febbraio 1987 il dott. P. Grimaldi ha vinto il concorso come ricercatore del gruppo di Chimica Generale della Facoltà di Scienze dell'Università della Basilicata .

Dal Settembre 1988 al Settembre 1989 ha lavorato come borsista all'Università libera di Bruxelles (ULB) sotto la direzione dei proff. I. Prigogine e G. Nicolis e in collaborazione con il prof. R. Lefever. Il lavoro svolto ha avuto come tema le transizioni di fase indotte da “ noise ” esterno (noise induced transitions) . In particolare egli ha operato nel campo delle cinetiche chimiche non lineari svolgendo un'analisi teorica dell'influenza di una perturbazione stocastica su di un sistema chimico aperto . I risultati raggiunti sono stati pubblicati .

Nel biennio 1989-91 la sua attività di ricerca ha riguardato la messa a punto di metodologie per la localizzazione del minimo assoluto di funzioni a più variabili . Tale problema è di fondamentale importanza nel caso di macromolecole di interesse biologico per le quali la ricerca della conformazione più stabile, cioè del minimo assoluto sulla ipersuperficie di potenziale della macromolecola, rappresenta un problema tuttora aperto . L'uso di tecniche

di annealing mediante dinamica molecolare e di considerazioni di meccanica statistica ha consentito al dott. P. Grimaldi e al prof. F. Lelj di localizzare, per la prima volta con certezza, il minimo globale dell'energia potenziale di una macromolecola di interesse biologico. Il lavoro svolto è stato pubblicato.

Tra il 1991 e il 1994 egli si è occupato di calcoli di meccanica e dinamica molecolare nonché studio delle superfici di potenziale di macromolecole di interesse biologico. In particolare sono stati studiati peptidi contenenti glicine bisostituite e frammenti peptidici dell'elastina. I risultati ottenuti sono stati pubblicati.

Dal 1995 il dott. P. Grimaldi ha avviato una nuova linea di ricerca riguardante lo studio della dinamica di processi chimici elementari mediante l'utilizzo di metodi globali. La necessità d'impiego di tali metodi scaturisce dal fatto che per la maggior parte di tali processi il modello matematico prevalentemente adoperato risulta essere inadeguato in quanto lo spazio soggiacente è Euclideo, mentre per un problema meccanico lo spazio delle fasi è generalmente di tipo non lineare. Ciò conduce alla nozione di varietà differenziale come spazio delle fasi in meccanica. Nei sistemi meccanici queste varietà hanno sempre una struttura geometrica simplettica. Pertanto il modello matematico per la meccanica consiste di una varietà simplettica insieme all'oggetto geometrico che si ottiene segnando differenziabilmente le fibre del fibrato associato alla varietà. Tali oggetti sono campi vettoriali, forme differenziali lineari, metriche Riemanniane o strutture simplettiche associate a Lagrangiane regolari. Poiché tale modello ammette un sistema di coordinate solo localmente è opportuno per la sua analisi far uso del calcolo intrinseco di Cartan piuttosto che di quello convenzionale di Newton. Lo studio di detti sistemi può essere ricondotto, sostanzialmente, a quello di equazioni differenziali su varietà differenziabili.

In taluni casi detto studio può essere effettuato in una varietà Riemanniana (Q, T) in cui la forma quadratica T definisce una trasformazione di Legendre che, rendendo il fibrato tangente $P = TQ$ canonicamente isomorfo al suo duale, trasferisce su P la naturale struttura simplettica del duale; sulla varietà simplettica P è possibile caratterizzare, in particolare, la struttura delle equazioni del secondo ordine.

In altri casi, invece, la forma quadratica T della varietà di Riemann (Q, T) introduce un principio variazionale che individua in Q la classe privilegiata dei moti geodetici, assegnando altresì a tutti gli altri moti una curvatura Riemanniana (non nulla) atta a descriverne la deviazione dalla geodeticità; mediante la curvatura Riemanniana è possibile, in particolare, caratterizzare le curve integrali di base delle equazioni del secondo ordine. Parte dei risultati ottenuti è stata pubblicata.

Tale tipo di problematica ha condotto il dott. P. Grimaldi ad approfondire le sue conoscenze in campo matematico. Il 16 luglio 1997 egli ha conseguito la laurea in Matematica, con lode, presso l'Università di Napoli "Federico II", discutendo una tesi di Fisica Matematica dal titolo "Dinamica Lagrangiana in forma implicita" relatore il prof. R. Grassini.

Dal 1998 al 2006 il dott. P. Grimaldi si è occupato dello studio di composti calcogeno-alogeno-organici mediante calcoli "ab initio" e con funzionali della densità elettronica. Particolare attenzione è rivolta alla localizzazione degli stati di transizione ai fini della messa a punto di ipotesi sui meccanismi di reazione. Alcuni dei risultati raggiunti sono stati pubblicati.

Dal 2007 il dott. P. Grimaldi si sta occupando della previsione della struttura tridimensionale di proteine mediante algoritmi basati sulle informazioni evolutive di sequenze di famiglie proteiche e sul principio di massima entropia.

Attività didattica

Il dr. P. Grimaldi ha svolto la sua attività didattica presso il Dipartimento di Scienze dell'Università della Basilicata articolandola nel seguente modo :

Anno Accademico 1988-89

In congedo per motivi di studio presso l'Università libera di Bruxelles (ULB).

Anni Accademici 1989-90 e 1990-91

Ha tenuto dei seminari integrativi per il corso di Chimica generale ed inorganica I .

Ha tenuto esercitazioni di laboratorio per il corso di Esercitazioni di preparazioni chimiche

I. Ogni esercitazione era articolata nel seguente modo :

- a)** seminario introduttivo
- b)** organizzazione dell'esperienza
- c)** assistenza durante l'esercitazione
- d)** correzione e discussione della relazione

Ha fatto parte delle commissioni d'esame, in qualità di cultore della materia, di Chimica generale ed inorganica I, Chimica generale ed inorganica II ed Esercitazioni di preparazioni chimiche I .

Anno Accademico 1991-92

Ha tenuto esercitazioni di laboratorio per il corso di Esercitazioni di preparazioni chimiche

I. Ogni esercitazione era articolata nel seguente modo :

- a)** seminario introduttivo
- b)** organizzazione dell'esperienza
- c)** assistenza durante l'esercitazione
- d)** correzione e discussione della relazione

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica .

Ha fatto parte delle commissioni d'esame di Chimica generale ed inorganica I, Esercitazioni di preparazioni chimiche I e Chimica generale ed inorganica con elementi di organica.

Anno Accademico 1992-93

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica. Ha fatto parte della Commissione di Esame di Laurea in Matematica.

Anni Accademici 1993-94 e 1994-95

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Esercitazioni di preparazioni chimiche I.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame di Chimica generale ed inorganica I, Esercitazioni di preparazioni chimiche I e Chimica generale ed inorganica con elementi di organica.

Ha tenuto lezioni, in qualità di docente supplente, per il corso di Esercitazioni di preparazioni chimiche I.

Anno Accademico 1995-96

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Esercitazioni di preparazioni chimiche I.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Anno Accademico 1996-97

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il suddetto corso.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.

Anno Accademico 1997-98

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica per il D. U. in Produzioni Animali della Facoltà di Agraria.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il suddetto corso.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Chimica generale I.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.

Anno Accademico 1998-99

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica .

Ha tenuto lezioni di esercitazioni per il corso di Laboratorio di Chimica generale ed inorganica.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Anno Accademico 1999-00

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica .

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il suddetto corso .

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale .

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica .

Anno Accademico 2000-01

Ha tenuto in affidamento per supplenza i corsi di Chimica generale ed inorganica con elementi di organica e di Chimica generale con elementi di Chimica-Fisica.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per i suddetti corsi.

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Fondamenti e Didattica della Chimica per la S.S.I.S.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.

Anno Accademico 2001-02

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica generale.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il suddetto corso.

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Fondamenti e Didattica della Chimica per la S.S.I.S.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.

Anno Accademico 2002-03

Ha tenuto in affidamento per supplenza i corsi di Chimica generale e di Laboratorio di Chimica Generale.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per i suddetti corsi.

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Fondamenti e Didattica della Chimica per la S.S.I.S.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.

Anno Accademico 2003-04 fino ad oggi

Ha tenuto in affidamento per supplenza il corso di Chimica generale.

Ha tenuto lezioni di esercitazioni numeriche per il suddetto corso.

Ha fatto parte delle commissioni d'esame per i corsi del raggruppamento di Chimica generale.

Ha fatto parte della Commissione di esame di Laurea in Chimica.