



Antonino Polimeno
Curriculum vitae et studiorum

Curriculum vitae

- Professore straordinario di Chimica Fisica, Università degli Studi di Padova, dal 2011
- Professore associato, Università degli Studi di Padova, 2001-2010
- Ricercatore universitario Università degli Studi di Padova, 1991- 2000
- Premio “A. Mion” 1997
- Visiting student in 1989-90 e visiting scientist in 1994-95 presso la Cornell University (N.Y., U.S.A.)
- Dottorato in Scienze Chimiche, Scuola di Dottorato dell’Università di Padova (1988-91)
- Premio “S. Bezzi” per l’AA 1987-88;
- Laurea cum laude in Chimica, Università degli Studi di Padova, 1987

Nato a Torino in 1963, Antonino Polimeno consegue il Dottorato in Scienze Chimiche presso la stessa Università nel 1991. È stato visiting scientist presso l’Universidade Nova de Lisboa nel 1997, l’Università Jagellonica di Cracovia nel 1998, University of Southampton nel 1998, Paul Scherrer Institute di Zurigo nel 1999, e le Università di Utrecht nel 1999, Freiburg nel 2001, Cornell nel 1994, 1995, 2003, 2006, 2010; di recente è stato invited speaker presso l’ETH di Zurigo, il Weizmann Institute, l’École Normale Supérieure di Parigi nel 2011 e 2012. È in questo periodo impegnato in attività di ricerca collaborative con il centro NIH-ACERT center per le spettroscopie (Cornell University, NY USA) diretto da Jack H. Freed, con M. Buck (Case Western Reserve University di Cleveland, OH USA), con D. Abergel e G. Bodenhausen (École Normale Supérieure, Parigi), Eva Meirovitch (Bar Ilan University, Rehevot, Israele), J. Kowalewski (Stockholm Universitet, Sweden).

È coordinatore del “Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale” del Dipartimento di Scienze Chimiche dell’Università di Padova dal 2007, vice-presidente della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana dal 2010, coordinatore della Sezione Calcolo del “Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali” dal 2009, e Direttore della Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari dell’Università di Padova dal 2012.

Le attività di ricerca - svolte nell’ambito di progetti internazionali (NIH USA, FP7), nazionali (PRIN) e locali (Progetti Strategici UniPD, Fondazione Cariparo) - sono principalmente dedicate allo sviluppo di metodi teorici per l’interpretazione di osservabili chimico-fisici dinamici in fasi condensate, con un’ enfasi su sistemi biologici e soft materials. Le aree principali di interesse sono la definizione di modelli per l’interpretazione di osservabili di spettroscopie magnetiche e ottiche, in membrane, proteine e nanosistemi. Altri interessi riguardano lo studio di sistemi nano e microfluidici con approcci mesoscopici e di dinamica molecolare. Nel corso dell’ultimo decennio, il gruppo di ricerca di Chimica Teorica di Padova ha contribuito in maniera determinante allo strumento di vari metodi formali basati sull’integrazione di approcci Fokker-Planck, metodi perturbativi, ed altre tecniche teorico/computazionali per la risoluzione e l’applicazione di modelli stocastici volti a predire fenomeni di rilassamento in substrati complessi, fino allo sviluppo di veri e propri metodi di spettroscopia computazionale, integrati con approcci quantistici.

Attività organizzativa e didattica

L'attività del Prof. Polimeno si svolge presso il gruppo di ricerca di Chimica Teorica dell'Università di Padova ed è orientata

- Allo studio delle proprietà formali di fasi liquide e liquido cristalline, nel cui ambito si è esplicata grazie ai progetti di ricerca finanziati dalla Comunità Europea: "Organization and Dynamics of Ordered Phases" (Human Capital and Mobility) dal 1994 al 1997; "Molecular Design of Functional Liquid Crystals" (Training and Mobility of Researchers) dal 1998 al 2002, e del progetto di ricerca COFIN 2001 "Cristalli liquidi per la progettazione, la realizzazione e la caratterizzazione di nuove organizzazioni molecolari".
- alla comprensione mediante modelli matematici dei fenomeni di trasferimento elettronico, finanziata dal progetto startup finanziato dall'Università di Padova "Effetti di solvatazione sulla dinamica di trasferimento elettronico" (2001), nonché allo studio di prototipi di sistemi nanometrici, con il supporto del progetto di Ateneo dell'Università di Padova "Nanoparticelle di oro come templati per la realizzazione di supermolecole" (2003)
- all'interpretazione di spettroscopie di risonanza magnetica e di spettroscopie ottiche in fasi condensate, ed alla costituzione di strumenti software ed hardware per un approccio integrato allo studio di sistemi complessi; tale attività è finanziata nell'ambito dei progetti: "Software architecture for nanomaterials designs: an integrated environment" (PRISMA - INSTM, 2005) di cui è stato Coordinatore Nazionale; "Piattaforma di calcolo distribuito ad alte prestazioni per la progettazione e caratterizzazione di materiali innovative" (CNR-INSTM PROMO 2006, 2007) di cui è Coordinatore Locale;
- allo studio di nanosistemi e sistemi molecolari in soluzione, mediante supporto fornito dal progetto "Metodi computazionali per lo studio di proprietà strutturali e dinamiche di nanoparticelle in sospensioni colloidali" (PRIN - MIUR 2005-2008) di cui è Coordinatore Locale
- allo studio teorico e computazionale di sistemi micro e nanofluidici, con il supporto del progetto di Ateneo dell'Università di Padova "Design, fabrication and characterization of prototype microfluidic devices: in silico description and manipulation of microchannels" (2008-2009) di cui è coordinatore e del Progetto di Eccellenza della Fondazione CARIPARO (2008-2010) "Microfluidics Laboratory for Scientific and Technological Applications" di cui è coordinatore del Workpackage Calcolo
- allo studio teorico di sistemi molecolari per il fotovoltaico organico con il supporto del Progetto di Eccellenza dell'Università degli Studi di Padova "HELIOS" (2010-2013), di cui è coordinatore del Workpackage Calcolo
- allo studio di moti di grande ampiezza in proteine con il supporto del Progetto di Eccellenza della Fondazione CARIPARO (2013-2016) "Modelling and Monitoring Motions in Proteins" di cui è coordinatore

Il Prof. Polimeno ha sviluppato varie collaborazioni nazionali ed internazionali con il Prof. J.H. Freed della Cornell University su metodologie teoriche per la simulazione di spettri ESR in fasi condensate e sistemi proteici, con il Prof. A.F. Martins (UNL, Portogallo) sullo studio di cristalli liquidi nematici mediante equazioni idrodinamiche con il Prof. G. Luckhurst (Southampton University, Regno Unito) sull'interpretazione di pattern dinamici del direttore in cristalli liquidi, con il Prof. Y. Levine (Università di Utrecht, Olanda) sullo sviluppo di nuove metodologie per lo studio di catene alchiliche e con il Prof. R. Righini, del LENS (European Laboratory of Non-Linear Spectroscopy) di Firenze, sull'applicazione di modelli stocastici avanzati all'interpretazione di spettroscopie ottiche ultraveloci. Più di recente il Prof. Polimeno ha sviluppato strette collaborazioni con la Prof.ssa Eva Meirovitch della Faculty of Life Sciences, Bar-Ilan University (Israele) e con il Prof. Matthias Buck della Case Western Reserve University di Cleveland sulla dinamica di proteine, con il Prof. Vincenzo Barone della Scuola Normale di Pisa sullo sviluppo di metodi integrati classici e quantistici per l'interpretazione di spettroscopie magnetiche, con il prof. Jozef Kowalewski dell'Università di Stoccolma sulla dinamica di polisaccaridi e con il Dr. Daniel Abergel dell'Ecole Normale Supérieure di Parigi sullo sviluppo di nuovi metodi teorici per la dinamica di macromolecole.

Il prof. Polimeno ha co-organizzato vari convegni nazionali ed internazionali, tra i quali

- "Complex Systems: structure, properties, reactivity and dynamics" (Cagliari 2005)
- VI Convegno di Chimica Computazionale (GICC 2006, S. Servolo, Venezia)
- COST P15 Action workshop "Dynamics in Electron Spin Resonance" (Padova, 2007)
- THETIS 2007 (Meeting Réseau Français de Chimie Théorique / GICC, Parigi, 2007)
- VII Conference on Computational Chemistry (CC7 2008, S. Servolo, Venezia)
- I e II Convegno della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (Pisa, 2012 e Padova 2013).

L'attività didattica del Prof. Polimeno si svolge interamente nell'ambito dei corsi di laurea in Chimica Chimica Industriale e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dell'Università di Padova. Il Prof. Polimeno coordina nell'ambito del Gruppo di Chimica Teorica di Padova numerosi laureandi, dottorandi e borsisti.

Attività scientifica 1987-2000

L'attività di ricerca del Dr. Polimeno è iniziata nel 1987 e fin dall'inizio è stata indirizzata allo studio mediante varie metodologie teoriche delle proprietà dinamiche molecolari e macroscopiche di fasi liquide.

Il lavoro di ricerca svolto è stato peraltro sempre imperniato su tre caratteristiche

- definizione formale accurata delle equazioni fondamentali del sistema considerato
- ricerca di efficaci metodologie computazionali e/o analitiche
- applicazione all'interpretazione di dati sperimentali, di solito ottenuti in diretta collaborazione con
- gruppi di ricerca italiani e stranieri

Le linee di ricerca fondamentali dell'attività di ricerca del primo biennio 1987-1988 è centrata sull'applicazione di modelli stocastici, basati su equazioni di diffusione e di Fokker-Planck, per l'interpretazione di fenomeni cinetici in fasi condensate, rappresentati come processi attivati associati a particelle sonda in un fase omogenea viscosa ed in presenza di potenziali multistabili. In particolare, in questo periodo sono stati sviluppati metodi computazionali ed analitici per il calcolo di costanti di velocità per la transizione tra due stati metastabili da condizioni di elevata inerzialità o bassa viscosità fino a condizioni di alta viscosità.

I modelli e le metodologie sviluppati sono stati in seguito applicati nel corso del 1989 al calcolo di dinamiche conformazionali. In questo periodo inizia anche una sistematica esplorazione di modelli stocastici applicati a liquidi polari, basati sullo sviluppo ed il trattamento di equazioni stocastiche multidimensionali che descrivano coordinate conformazionali di singole molecole accoppiate a coordinate collettive di solvente. Metodologie analoghe vengono applicate in seguito anche all'interpretazione di moti rotazionali di singole molecole in fasi liquide. Lo sviluppo di metodi numerici ed analitici avanzati per il trattamento di equazioni stocastiche a più corpi, anche in presenza di diverse scale dei tempi dei vari processi di rilassamento accoppiati ai moti molecolari, porta in seguito all'esplorazione di vari modelli avanzati applicati all'interpretazione di processi dinamici in liquidi complessi, che costituisce il lavoro di principale interesse svolto nel triennio 1990-1992., anche nell'ambito della collaborazione con il gruppo di J.H. Freed presso la Cornell University.

I modelli stocastici multidimensionali sono stati successivamente applicati nel biennio 1993-1994 all'interpretazione di fenomeni di trasferimento elettronico intramolecolare in fasi liquide, ed allo studio di modelli suscettibili di soluzioni analitiche per l'interpretazione di spettri IR nel lontano infrarosso. Nel 1994 viene anche iniziata una nuova linea di ricerca dedicata alla caratterizzazione di coordinate collettive di solvente basata sull'utilizzazione di studi di Dinamica Molecolare, che includano opportune definizioni operative di coordinate di cage o gabbia di molecole in solvente. L'insieme degli strumenti operativi e delle metodologie di trattamento di operatori stocastici, anche utilizzando tecniche analoghe a quelle utilizzate nel trattamento di operatori quanto-meccanici porta nel 1995 allo sviluppo di equazioni interpretative di spettroscopie di risonanza di spin elettronico (ESR) in fasi liquide che includono coordinate solvente ed alla generalizzazione di coordinate di cage ai moti rotazionali. Nel 1995-1996 sono proseguite le

applicazioni all'interpretazione di fenomeni di trasferimento elettronico, e sono state ampliate le applicazioni all'interpretazione di spettroscopie ESR alle fasi liquide cristalline. Iniziano inoltre in questo periodo e proseguono nel 1997, applicazioni dei modelli stocastici sviluppati nel biennio precedente allo studio di spettroscopia di fluorescenza risolta nel tempo per probe rigidi ed in presenza di moti conformazionali interni, in liquidi polari isotropi ed in fasi nematiche.

A partire dal 1996 l'attività di ricerca si è andata sviluppando secondo una linea complementare allo studio di fenomeni dinamici a livello molecolare peraltro proseguita insieme allo studio di fluorescenza risolta nel tempo di probe rigidi in fasi nematiche, avviando studi sulle proprietà idrodinamiche di fasi liquide, in particolare cristalli liquidi nematici. L'attività scientifica è stata favorita da numerosi incontri, avvenuti in Padova o presso altre sedi universitarie. Nel 1996 il Prof. Polimeno si è recato presso il Paul Scherrer Institut di Zurigo su invito del Prof. Peter Talkner, nel febbraio 1997 ha visitato i laboratori del Prof. Wolfgang Rettig presso la Humboldt Universität di Berlino, dove ha tenuto una serie di seminari sul tema "Equazioni stocastiche e loro applicazioni in Chimica Fisica"; nell'agosto dello stesso anno e nel 1998 si è recato presso il Centro de Investigacao de Materiais, Faculdade de Ciencias e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, dove ha svolto attività di ricerca presso il gruppo del Prof. Assis F. Martins, e presso l'Università di Southampton, presso il gruppo di ricerca del Prof. Geoffrey Luckhurst. Nel 1999 ha visitato il Laboratorio del Prof. Yehedi Levine, presso l'Università di Utrecht.

In particolare dal 1998 al 2001 sono stati avviati studi basati sulla soluzione numerica delle equazioni al continuo di Leslie-Ericksen-Parodi per l'interpretazione di proprietà idrodinamiche in nematici. È stato affrontato il problema della completa risoluzione numerica in due dimensioni, l'applicazione a celle e display, la correlazione con misure di rilassamento dielettrico, reologiche e spettroscopie ESR, NMR.

Attività scientifica 2001-2003

L'attività di ricerca del Prof. Polimeno nel triennio 2001-2003 è stata dedicata allo studio di fenomeni dinamici in fasi liquide a livello molecolare, ed in particolare allo sviluppo di metodi originali per il calcolo di proprietà dinamiche di cristalli liquidi nematici e polimeri nematici. Nel 2000 e parte del 2001 sono stati avviati studi basati sulla soluzione numerica delle equazioni al continuo di Leslie-Ericksen-Parodi per l'interpretazione di proprietà idrodinamiche in nematici, affrontando il problema della completa risoluzione numerica in tre dimensioni. Dalla fine del 2001 alla metà del 2003 l'attività di ricerca si è concentrata sull'elaborazione di nuove metodologie statiche e dinamiche per lo studio di sistemi complessi, con particolare attenzione rivolta ai sistemi autoaggreganti (mono e bi-layers di catene fosfolipidiche). È inoltre proseguito lo sviluppo di metodologie computazionali per il trattamento di equazioni idrodinamiche applicate a fasi nematiche; in particolare con lo sviluppo di metodologie per il trattamento completo di geometrie tridimensionali, anche in presenza di stress meccanici, campi magnetici ed elettrici ed elevate viscosità (e.g. polimeri nematici).

Nel corso del triennio il Prof. Polimeno ha mantenuto attive collaborazioni e ha visitato più volte i laboratori di Lisbona, Friburgo, Southampton, Utrecht, Ithaca. Nel triennio 2001-2003 il Prof. Polimeno è stato *invited speaker* ai convegni internazionali "International Symposium on ESR development" (Ithaca 2003), "Computational Methods for Polymers and Liquid Crystalline Polymers" (Erice 2003), ed è stato parte del comitato organizzatore dei seguenti convegni: XXXI Convegno di Chimica Fisica (Padova, 2001), "Structure, dynamics and liquid crystals: A seminar in memory of Pier Luigi Nordio" (Padova, 2002), V Congresso del Gruppo Italiano di Chimica Computazionale (Certosa di Pontignano, 2003).

Nel 2002 e 2003 il Prof. Polimeno ha fatto parte, come esperto invitato permanente, del Consiglio Direttivo del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale (GICC) della Società Chimica Italiana, nel cui ambito si è occupato di varie tematiche relative allo sviluppo della chimica computazionale ed in particolare alla diffusione delle risorse di calcolo distribuito [<http://depweb.dcf.unimi.it/gicc>].

Il Prof. Polimeno ha fatto parte nel triennio 2001-2003 del progetto TMR *Molecular Design of Functional Liquid Crystals*, del progetto di ricerca COFIN 2001 *Cristalli liquidi per la progettazione, la realizzazio-*

ne e la caratterizzazione di nuove organizzazioni molecolari, di due progetti finanziati dall'Università di Padova *Effetti di solvatazione sulla dinamica di trasferimento elettronico* e *Nanoparticelle di oro come templati per la realizzazione di supermolecole*.

L'attività di ricerca teorica svolta nel corso del triennio 2001-2003 si è concentrata sullo sviluppo di tecniche di simulazione mesoscopica mediante l'uso di algoritmi Monte Carlo, Dissipative Particle Dynamics, modelli idrodinamici e metodi stocastici. Lo studio di modelli per la determinazione di effetti dinamici di solvatazione per processi reattivi che coinvolgono nanoparticelle in ambienti fluidi complessi è stato condotto nell'ambito della borsa di studio "Metodi Computazionali per lo Studio della Dinamica di Nanoparticelle in Soluzione", svolta dal Dr. Federico Meneghini presso il Dipartimento di Chimica Fisica sotto la supervisione del Prof. Polimeno, mentre l'analisi di modelli idrodinamici è stata condotta con l'ausilio del Dr. Alexandre Escalhão Gomes per il titolo di Douctorado em Engenharia de Materiais presso l'Universidade Nova de Lisboa.

Attività scientifica 2004-2005

L'attività di ricerca relativa al biennio 2004-2005, si è venuta sviluppando secondo alcune linee primarie, che costituiscono una naturale evoluzione dell'attività precedente con una accentuata attenzione alle applicazioni nanotecnologiche e di scienze dei materiali

- Studio delle proprietà statiche di sistemi micellari e nanoparticelle
- Studio delle proprietà dinamiche di sistemi micellari e nanoparticelle
- Sviluppo di modelli stocastici per coordinate di polarizzazione
- Interpretazione di effetti di confinamento

L'analisi di aggregati di molecole flessibili è stata condotta su sistemi planari e micellari adottando uno schema *off*-lattice Monte Carlo a pressione e temperature costanti (MC-NPT), considerando insiemi di catene fosfolipidiche aventi fino a 20 gradi di libertà torsionali interni in arrangiamenti monostrati planari e sferici. È stato sviluppato un metodo originale per la simulazione delle proprietà conformazionali di molecole surfattanti legate ad una superficie. L'algoritmo fa uso della sovrapposizione di riarrangiamenti conformazionali locali nelle singole catene. La generazione di spostamenti di coppie di atomi soggette a vincoli geometrici è conseguito in modo computazionalmente efficiente ai fini dell'esplorazione MC dello spazio delle fasi mediante l'impiego del metodo dei minimi quadrati.

Potenziamenti torsionali opportuni sono utilizzati per determinare l'energetica della catena. Mediante queste tecniche è stato possibile studiare proprietà statiche e dinamiche di monostrati e micelle, come fenomeni di transizione di fase in monostrati, diffusione laterale in micelle e monostrati, andamento dei parametri d'ordine e dei tempi di correlazione rotazionali in catene fosfolipidiche.

Una descrizione basata sulla tecnica Dissipative Particle Dynamics (DPD) è stata sviluppata per lo studio delle proprietà dinamiche di un sistema prototipo di cluster d'oro protetto da un monostrato di catene alchiliche, mediante l'adattamento di simulazioni standard DPD all'analisi di un core semirigido con gradi di libertà rotazionali oltre che traslazionali. La tecnica DPD è stata sviluppata nell'ultimo decennio a partire dagli studi di Hoogerbrugge and Koelman [P.J. Hoogerbrugge, J.M.V.A. Koelman, Europhys. Lett. **19**, 155 (1992)] e successivamente, tra gli altri, di Groot e Warren [R.D. Groot, P.B. Warren, J. Chem. Phys. **107**, 4423 (1997)], per lo studio di sistemi colloidali e polimerici. Nel complesso le tecniche DPD sono simili ai metodi standard Molecular Dynamics (MD) o Brownian Dynamics, e sono basate sulle equazioni di Newton per il moto di una collezione di "beads" o unità di base del sistema, che possono essere elementi di fluido (per lo studio di problemi idrodinamici) o collezioni di molecole (per studi *coarse grained* di polimeri). La novità delle tecniche DPD consiste nell'inclusione di forze fluttuanti e di dissipazione direttamente nelle equazioni del moto che consentono una rapida termalizzazione del sistema e la descrizione efficiente di comportamenti dinamici a tempi lunghi (anche dell'ordine dei ms), considerevolmente superiori a quelli accessibili a semplici simulazioni MD.

Attività scientifica 2006-2010

L'attività scientifica del periodo 2006-2010 si è sviluppata lungo tre linee di ricerca primarie: (1) la creazione di strumenti teorici integrati per la coniugazione di metodi classici stocastici e quantistici per lo studio e l'interpretazione di fenomeni spettroscopici magnetici (ESR, NMR) ed ottici (fluorescenza, TPA); (2) lo sviluppo di metodi per lo studio di reazioni chimiche in fasi liquide e liquido cristalline mediante tecniche *multiscala* che coniughino parametri macroscopici e informazioni molecolari; (3) l'esplorazione di metodologie per lo studio, la caratterizzazione teorica e la descrizione di dispositivi microfluidici e nanofluidi.

La prima attività è stata svolta in connessione con il gruppo di ricerca del prof. Vincenzo Barone dell'Università di Napoli, anche nell'ambito della progettualità espressa dal Centro di Riferimento VIL-LAGE dedicato al coordinamento in Italia delle attività di chimica computazionale per lo studio di sistemi complessi: tra gli esiti di interesse, si ricorda lo sviluppo di nuovi codici applicativi diffusi sotto forma di web services (E-SPIRES per lo studio di spettroscopie ESR e COPPS per lo studio di spettroscopie NMR; entrambi i programmi sono disponibili presso il sito <http://www.chimica.unipd.it/licc>).

La modellizzazione di fluidi complessi in condizioni di non-equilibrio ha ricevuto negli ultimi anni un forte impulso dall'applicazione di metodologie miste. Gli approcci più comuni prevedono la modellizzazione di sistemi tri-dimensionali formati particelle disperse in fluido, racchiuse in canalicoli o capillari. Lo sviluppo di un progetto ad ampio respiro che intenda applicare in modo integrato e coeso le tecniche più moderne di simulazione alla previsione di fenomeni reologici in geometrie capillari può essere idealmente configurato secondo due punti principali: determinazione di forze inter-corpo e corpo-fluido, ed implementazione di metodologie di simulazione *coarse-grained* per la descrizione sistematica di flussi in capillari mediante l'impiego di tecniche multiscala.

Attività scientifica 2011-2012

Nel biennio 2011-2012 sono stati iniziati studi dedicati ad approcci QM/MM e modellizzazione stocastica e lo sviluppo di algoritmi genetici in combinazione con descrizioni QM/MM in-silico, metodi computazionali avanzati per trattamenti Liouville-stocastici per la simulazione di osservabili spettroscopiche EPR, NMR. La modellizzazione delle osservabili sperimentali, nel contesto della risonanza di spin elettronico, è stata basata su trattamenti esatti ed approssimati per il calcolo delle densità spettrali legate ad osservabili rotazionali ottenute da modelli stocastici multi-corpo. L'affidabilità dei modelli è stata testata in vari contesti applicativi in funzione dei vari processi di rilassamento, tra loro accoppiati, i quali determinano sia le dinamiche a tempi corti (ad es. il moto confinato della sonda magnetica) che le dinamiche a tempi lunghi (ad es. la riorganizzazione della struttura locale del solvente attraverso moti su larga scala).