

P.G. De Benedetti è Professore Ordinario di Chimica-Fisica con i seguenti insegnamenti:

- 1- Chimica fisica biologica ( Biophysical chemistry) con esercitazioni di modellistica molecolare computazionale per i corsi di Laurea Specialistici in Biotecnologie industriali ed in Chimica
- 2- Chimica fisica delle Macromolecole corso di laurea in Chimica.
- 3- Modellazione atomistica dei materiali con esercitazioni computazionali per il corso di Laurea Specialistico in Progettazione di Nuovi Materiali.( Interfacoltà : Scienze ed Ingegneria).

L'attività scientifica, ininterrottamente svolta nell'arco di trent'anni, è documentata da oltre 130 pubblicazioni su riviste internazionali. Inoltre, numerosi capitoli tematici e metodologici, prevalentemente di natura modellistico-computazionale finalizzati ai biosistemi, sono stati pubblicati su libri e collane scientifiche internazionali.

Tale attività può essere schematizzata come segue.

- a) Determinazione di proprietà chimico-fisiche (spettroscopiche e di reattività) in serie di molecole organiche e studio delle relazioni quantitative proprietà-struttura mediante modelli teorico-computazionali ed analisi QSPR.
- b) Definizione e sviluppo di descrittori e predittori atomistico-molecolari per la modellazione e previsione computazionale di proprietà chimico-fisiche e biologiche di molecole di interesse farmacologico ad alta complessità chimica.
- c) Sviluppo di protocolli computazionali per la progettazione di molecole con proprietà e funzioni biologiche, farmacologiche e tecnologiche desiderate.
- d) Sviluppo di procedure modellistico-computazionali e simulative per applicazioni nell'ambito dell'ingegneria molecolare e proteica di interesse biotecnologico.
- e) Modellistica "in silico" delle relazioni struttura-proprietà-funzione di proteine enzimatiche.
- f) Simulazioni di meccanica e dinamica molecolare ed analisi correlativa per la descrizione dei meccanismi atomistico-molecolari e supramolecolari della trasduzione-trasmissione dell'informazione chimica mediata da recettori proteici di membrana accoppiati alla proteina G.

Inoltre è affiliato a numerose società scientifiche, è membro del comitato tecnico-scientifico del CINECA, è stato direttore del Centro Interdipartimentale di Calcolo Automatico ed Informatica Applicata (CICAIA) dell'Università di Modena e Reggio Emilia ed è attualmente direttore del Laboratorio di Calcolo Scientifico Avanzato Interdipartimentale della stessa Università. Infine, sono attive numerose collaborazioni nazionali ed internazionali con gruppi e centri di ricerca, pubblici e privati di grande prestigio (come documentato anche dalle pubblicazioni scientifiche) per la sperimentazione biofisica, biochimica, di biologia molecolare, farmaceutica e farmacologica.