

Seminario Ricercatore a Tempo Determinato Tipologia B

SSD CHIM/01

Settore concorsuale 03/A1

Titolo: “Metodologie analitiche innovative per lo studio di sistemi reali”

Dott.ssa Roberta Risoluti

Lo studio di sistemi reali ha da sempre rappresentato una sfida che impegna continuamente il chimico analitico nello sviluppo di metodologie analitiche innovative sensibili ed accurate, che possano offrire una caratterizzazione multicomponente della matrice in esame. In tale ottica, lo sviluppo di metodologie analitiche accoppiate a sistemi di analisi multivariata dei dati, si rivela un potente strumento di indagine analitica, che consente di implementare l'informazione derivante dalle analisi strumentali e di sviluppare modelli di predizione multicomponente. In aggiunta, nell'ambito delle attuali misure di “smart specialization strategy”, le peculiarità di tecniche analitiche semplici rapide e che non richiedono il pretrattamento del campione, risultano particolarmente vantaggiose e consentono di ridurre i tempi ed i costi delle analisi, pur mantenendo l'affidabilità analitica del risultato.

In tale ottica, l'attività di ricerca della dott.ssa Risoluti si focalizza sullo sviluppo di nuove piattaforme analitiche basate sull'accoppiamento di tecniche spettroscopiche miniaturizzate e tecniche di analisi termica, a strumenti di analisi chemiometrica dei dati.

In particolare, gli ambiti di ricerca interessano in modo multidisciplinare lo studio e l'ottimizzazione di protocolli di indagine a partire dalla fase pre-analitica fino allo “scale-up” per applicazioni su matrici reali, attraverso strumenti chemiometrici di disegno sperimentale nei diversi settori: clinico, biomedico, forense, sicurezza e qualità in ambito alimentare, nuovi materiali, farmaceutico, drug-delivery ed industriale.

La ricerca svolta nell'ambito della spettroscopia, riguarda la messa a punto di metodiche di screening mediante tecniche ifenate basate sulla spettroscopia nel vicino e medio infrarosso (FTNIR, FTIR) accoppiate all'analisi chemiometrica ed in particolare lo sviluppo di piattaforme analitiche miniaturizzate basate sull'accoppiamento MicroNIR/Chemometrics, attraverso strumenti di analisi esplorativa “Principal Component Analysis” (PCA), analisi di classificazione e class-modelling, metodi di regressione multivariata “Partial Least Square” e “Principal Component Regression” (PLS, PCR).

In tale ambito, il seminario illustrerà protocolli di classificazione e quantificazione di analiti in matrici complesse di interesse forense tra cui le sostanze d'abuso in campioni da strada ed in matrice biologica, le nuove sostanze stupefacenti, le sostanze esplosive, la canapa industriale ed i prodotti di filiera.

Nell'ambito della termoanalisi, verrà presentata una nuova linea ricerca che si occupa dello sviluppo di metodologie termoanalitiche accoppiate alla chemiometria (TGA/Chemometrics), per la caratterizzazione multiparametrica di matrici biologiche complesse, quali sangue ed umor vitreo. In particolare, saranno illustrati nuovi protocolli analitici indirizzati all'implementazione di tecniche innovative, efficaci ed economiche in grado di eseguire la diagnosi di 1° livello di malattie ereditarie del globulo rosso, in modo specifico ed a basso costo. Dal punto di vista metodologico il nuovo test consente di eseguire lo screening di patologie ereditarie del globulo rosso attraverso il prelievo di pochi microlitri di sangue intero e di fornire in poco più di 1 h risposte attendibili riproducibili e con un'accuratezza analitica al pari delle metodiche di conferma.

Gli sviluppi più recenti di tale approccio (TGA/Chemometrics) hanno interessato lo studio tanatocronologico di umor vitreo, per la determinazione del tempo di morte in ambito forense. Tale approccio ha consentito di sviluppare modelli di predizione multiparametrici che indirizzino alla corretta cronologia della morte, superando i limiti delle metodiche attuali.