UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Analytical Methods in Formulation Chemistry

2223-2-F5401Q060

Obiettivi

Obiettivo principale dell'insegnamento è fornire allo studente i fondamenti teorici e gli strumenti operativi delle principali strategie analitiche per l'ottimizzazione razionale di formulazioni e per il trattamento adeguato dell'informazione contenuta nei dati chimici sperimentali, così da consentire lo sviluppo di un approccio science-based che focalizzi il meccanismo di azione di ciascun componente che contribuisce al raggiungimento delle funzionalità richiesta della formulazione. La conoscenza dei principi e delle condizioni operative delle principali tecniche nell'ambito del disegno sperimentale per le formulazioni e le miscele verrà sviluppata insieme alla capacità di scegliere e di gestire gli approcci di indagine più adatti alle finalità dell'analisi. Lo studente saprà quindi valutare le caratteristiche degli approcci fondamentali, i campi di applicazione, individuarne i vantaggi e gli svantaggi e sarà quindi in grado di suggerire la scelta della soluzione ritenuta più idonea per uno specifico problema.

In particolare, al termine del corso, lo studente dovrà dimostrare di aver raggiunto i seguenti obiettivi formativi:

Conoscenza e capacità di comprensione:

o descrivere le principali strategie analitiche per le formulazioni presentati nel corso

o descrivere i parametri fondamentali per la valutazione dei risultati

o descrivere vantaggi e svantaggi dei diversi approcci studiati

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

o selezionare la strategia più adatta ad affrontare un problema specifico

o prevedere quale tipo di informazione sarà possibile enucleare dai dati in esame

o valutare la possibilità di utilizzare strategie alternative per la soluzione del problema

Autonomia di giudizio

o acquisire le conoscenze e competenze in grado di sviluppare una capacità di comprensione critica dei principali metodi di disegno sperimentale applicato all'ambito delle formulazioni

o selezionare gli approcci ed i parametri utili ad estrarre specifiche informazioni dai dati in esame

o redigere e giustificare una discussione critica sui metodi utilizzati e sui risultati ottenuti

Capacità di apprendimento

o comprendere le diverse tecniche studiate e la loro collocazione metodologica al fine di un impiego corretto e mirato al problema da risolvere

Contenuti sintetici

Introduzione al disegno sperimentale. Disegni sperimentali per lo screening dei fattori. I modelli di regressione per il disegno sperimentale. Disegno sperimentali per l'ottimizzazione. Dominio sperimentale per le miscele. Disegni sperimentali e modelli per lo studio di formulazioni. Esperienze pratiche in laboratorio per acquisire gli strumenti e le modalità di analisi.

Programma esteso

Introduzione al disegno sperimentali per le formulazioni. Introduzione al disegno sperimentale: terminologia e metodologia della ricerca sperimentale: analisi del problema, pianificazione degli esperimenti, esecuzione degli esperimenti, analisi dei dati e modellazione. Disegni fattoriali completi per lo screening: codifica dei fattori, piano sperimentale e matrice sperimentale, calcolo degli effetti e loro varianza, calcolo dei coefficienti con la regola dei segni. Disegni fattoriali frazionari: effetti confusi e risoluzione. Disegni di Plackett-Burman e utilizzo di fattori dummy. Modelli di regressione per il disegno sperimentale, stima dei coefficienti, matrici di informazione e dispersione, varianza dei residui come stima della varianza sperimentale, gradi di libertà nel disegno sperimentale. Diagnostica del modello di regressione: ANOVA e lack of it, residui, normal probability plot, precisione delle predizioni, intervalli di confidenza per i coefficienti, convalida attraverso punti di prova. Metodi di ottimizzazione: il metodo di path ascent e metodo simplex, disegni fattoriali completi a tre livelli, i disegni compositi centrali, i disegni di Dohelert, i disegni di Box-Behnken, i disegni D-ottimali. Superfici di risposta. Modellazione a risposta multipla: desiderabilità e fronte di Pareto. Esempi di applicazioni del disegno sperimentale per fattori indipendenti.

Disegni sperimentali per le formulazioni. Dominio sperimentale per miscele e simplex, plot ternari per miscele. Metodi di regressione per i disegni sperimentali per le miscele: polinomi canonici, interpretazione di coefficienti ed effetti. Disegni per miscele: Simplex-Lattice e Simplex-Centroid Designs. Domini sperimentali regolari e irregolari per miscele: limiti inferiore e superiore, consistenza dei limiti, pseudo componenti, determinazione del dominio simplex e numero di vertici. Disegni sperimentali per miscele con domini regolari e irregolari. Punti candidati per domini irregolari. Disegni D-optimal e identificazione del punto di controllo per miscele. Strategie per la selezione di componenti significative per ottimizzare la funzionalità della formulazione. Approcci per lo studio di sistemi comprendenti miscele e fattori indipendenti. Esempi di applicazioni del disegno sperimentale per lo studio di formulazioni.

Esperienze pratiche in laboratorio per acquisire strumenti e metodi di analisi.

Prerequisiti

Nozioni di base sui principali indici statistici elementari, richiami di analisi multivariata, concetto di varianza sperimentale, capacità operativa informatica di base nelle esperienze pratiche in laboratorio.

Modalità didattica

Il corso si suddivide in una parte di lezioni frontali, in cui vengono fornite le nozioni teoriche e pratiche. Alla parte frontale sono poi affiancate esperienze pratiche di laboratorio per acquisire gli strumenti e le modalità operative dei metodi analitici per la chimica delle formulazioni.

Materiale didattico

Vengono fornite le slide delle lezioni sulla pagina e-learning del corso. Inoltre, il docente fornisce tramite piattaforma e-learning un libro elettronico sui fondamenti del disegno sperimentale. Oltre al materiale didattico fornito dal docente, può risultare utile il seguente libro di testo: Gareth A. Lewis, Didier Mathieu, Roger Phan-Tan-Luu, Pharmaceutical experimental design, Dekker, New York, 1999. Il libro è disponibile in formato elettronico nella biblioteca di ateneo. Vengono infine forniti strumenti di calcolo in Excel e Matlab per affrontare le esperienze pratiche di laboratorio.

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Secondo semestre

Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'esame consiste in una prova orale in cui sono discussi gli argomenti presentati nelle lezioni. Nella prova orale viene anche discussa una relazione relativa ad un case study fornito dal docente e sviluppato dallo studente. Oltre all’apprendimento delle nozioni fondamentali esposte nel corso, vengono valutate anche le capacità e attitudini dello studente ad adattare i fondamenti teorici a particolari condizioni operative e pratiche; viene inoltre valutata la capacità espositiva e adeguatezza del linguaggio dello studente. Non sono previsti salti di appello. L’esame può essere sostenuto a richiesta in lingua inglese.

Orario di ricevimento

Previo appuntamento tramite e-mail, il docente è sempre disponibili a ricevere gli studenti.

Sustainable Development Goals