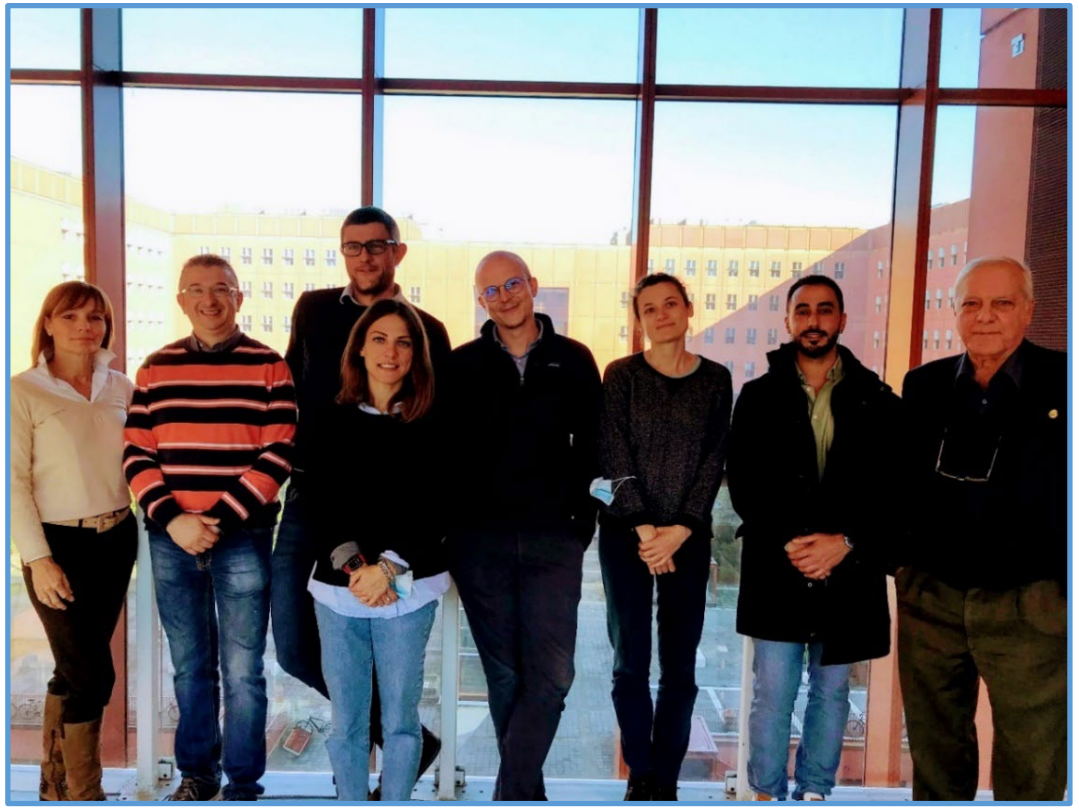
Milano Chemometrics and QSAR Research Group

http//michem.unimib.it/



- chemometrics
- molecular modelling + QSAR
- analytical chemistry
- experimental design

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Le tesi di laurea sono svolte in relazione ai progetti di ricerca del gruppo:

- sviluppo di nuovi metodi **chemiometrici**
- applicazioni **QSAR/QSPR** su risposte di interesse ambientale, biologico, farmacologico e tossicologico
- applicazioni chemiometriche su ***big data*** **di natura analitica**
- sviluppo e ottimizzazione di metodi innovativi di microestrazione/campionamento da matrici complesse attraverso tecniche «**green**»
- Studio della fotodegradazione di **contaminanti organici** potenzialmente tossici e stima dei loro tempi di semi-vita mediante sviluppo di metodi analitici

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Chemiometria (machine learning)

dati da piattaforme analitiche

Open Access | Feature Paper | Article

Multi-Task Neural Networks and Molecular Fingerprints to Enhance Compound Identification from LC-MS/MS Data

by Viviana Consonni, Fabio Gosetti, Veronica Termopoli, Roberto Todeschini, Cecile Valsecchi and Davide Ballabio *

Department of Earth and Environmental Sciences, University of Milano-Bicocca, Piazza della Scienza 1, 20126 Milano, Italy

* Author to whom correspondence should be addressed.

Academic Editor: Lukasz Komsta

Molecules **2022**, *27*(18), 5827; https://doi.org/10.3390/molecules27185827

Received: 11 August 2022 / Accepted: 5 September 2022 / Published: 8 September 2022

computational modeling to predict molecular properties

Journal of CHEMOMETRICS

SPECIAL ISSUE - RESEARCH ARTICLE | Full Access

Predicting molecular activity on nuclear receptors by multitask neural networks

Cecile Valsecchi, Magda Collarile, Francesca Grisoni, Roberto Todeschini, Davide Ballabio, Viviana Consonni

First published: 09 December 2020 | https://doi.org/10.1002/cem.3325 | Citations: 8

Full Text Bicocca

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Attività Sperimentale
LC-MS/MS
GC-MS

Open Access Article

Identification of Photodegradation Products of Escitalopram in Surface Water by HPLC-MS/MS and Preliminary Characterization of Their Potential Impact on the Environment

by Veronica Termopoli, Viviana Consonni, Davide Ballabio, Roberto Todeschini, Marco Orlandi and Fabio Gosetti *

Department of Earth and Environmental Sciences (DISAT), University of Milano-Bicocca, Piazza della Scienza 1, 20126 Milano, Italy

* Author to whom correspondence should be addressed.

Academic Editor: Laura Dugo

Separations **2022**, *9*(10), 289; https://doi.org/10.3390/separations9100289

Received: 8 September 2022 / Revised: 29 September 2022 / Accepted: 1 October 2022 / Published: 5 October 2022

Sviluppo di nuovi metodi analitici di microestrazione/campionamento da matrici complesse basati su tecniche «green»: SPME, MIMS, DLLME, SDME
Ottimizzazione dei metodo attraverso DoE

Studio della fotodegradazione di contaminanti organici (farmaci, pesticidi, ecc) potenzialmente tossici e stima dei loro tempi di semi-vita in ambiente acquatico mediante metodi chemiometrici

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Le tesi possono essere:

- Interne
- Estero mediante Erasmus Traineeship
  - Università (Spagna, Olanda, Slovenia, Danimarca, etc…)
  - Industria

Competenze acquisibili:

- acquisire principi **teorici** e **applicativi** della chemiometria/machine learning
- acquisire competenze **analitico-strumentali** su tecniche di trattamento del campione/cromatografia/spettrometria di massa
- utilizzo avanzato software per l'analisi dati
- programmazione (eventuale)

Milano Chemometrics and QSAR Research Group

Milano Chemometric

http//michem.unimib.it/