

Dottorato di Ricerca in Scienze Molecolari e Biomolecolari, Ciclo 40

D.PhD.2. Pianificazione e organizzazione delle attività formative e di ricerca per la crescita dei dottorandi

Per la pianificazione e l'organizzazione delle attività formative e di ricerca dei Dottorandi in Scienze Molecolari e Biomolecolari, ci si avvale delle competenze sia dei componenti del Collegio che di studiosi e studiose, esperti e esperte italiani/internazionali di elevato profilo provenienti dal mondo accademico e dagli enti di ricerca.

I corsi specialistici (lezioni frontali) verranno erogati nell'arco dell'anno di riferimento (dal 1 Novembre al 31 Ottobre) mentre le date dei seminari specialistici e dei seminari interdisciplinari e trasversali dipenderanno dalla disponibilità dei relatori coinvolti. **In ogni caso i Dottorandi saranno avvisati in tempo utile in merito alla data, orario, luogo e modalità di erogazione di tutte le attività formative.**

Di seguito la programmazione prevista delle attività di didattica e di ricerca per i Dottorandi in Scienze Molecolari e Biomolecolari, Ciclo 40.

Attività formativa programmata/prevista

L'attività formativa è espressa in crediti formativi universitari (CFU) (60 per ogni anno) ed è articolata in:

- 1. Attività di laboratorio e di sperimentazione:** *I Dottorandi realizzeranno gli esperimenti relativi al proprio progetto di ricerca svolgendo le attività sperimentali presso i laboratori presenti sia nel Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche dell'Università di Palermo, sede amministrativa del Dottorato di Ricerca in Scienze Molecolari e Biomolecolari, sia presso le altre strutture italiane e straniere previste nel percorso formativo del Dottorando. Verranno espletate attività che riguardano la sintesi, la caratterizzazione chimica, chimicofisica e biologica dei sistemi oggetto degli specifici progetti di ricerca. Tali attività sperimentali potranno includere anche l'isolamento di sostanze di origine naturale, la loro purificazione, caratterizzazione e valutazione della loro eventuale attività nonché potrà essere valutato il loro potenziale impiego in vari ambiti, quali per esempio l'ambito chimico, farmaceutico ed alimentare. Non si escludono attività sperimentali che riguardino fonti energetiche alternative e la valutazione di effetti antropici e rischi ambientali. Inoltre verrà promossa la frequenza del dottorando a corsi di natura tecnico/pratica organizzati dal tutor sia presso i propri laboratori, sia presso le case produttrici delle strumentazioni di interesse o anche nell'ambito di iniziative dell'Università di Palermo o di altre sedi. Verrà così offerta al Dottorando la possibilità di entrare in contatto con ricercatori esperti e tecnici altamente specializzati nell'uso delle apparecchiature disponibili presso vari laboratori di ricerca. La didattica laboratoriale consentirà al Dottorando di acquisire una certa autonomia nello svolgimento delle attività sperimentali e l'assunzione di*

*responsabilità dei risultati ottenuti singolarmente e/o in collaborazione con il gruppo di ricerca in seno al quale svolgerà il proprio progetto: **minimo 40 CFU/anno***

2. Insegnamenti specialistici frontali (vedi dettaglio di seguito): **max 8-11 CFU/anno**
3. Corsi di alta formazione, partecipazione a Scuole Dottorali, Summer School: **max 5 CFU/anno**
4. Partecipazione a Workshop, Congressi, Convegni: **max 5 CFU/anno**
5. Altre attività didattiche (seminari, formazione interdisciplinare, multidisciplinare e transdisciplinare) (vedi dettaglio di seguito): **max 20 CFU/anno**

Dettaglio

Insegnamenti specialistici frontali previsti (distinti da quelli impartiti in insegnamenti relativi ai corsi di studio di primo e secondo livello): max 8-11 CFU/anno

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
1.	<i>Tossicità dell'Ossigeno e meccanismi di protezione</i>	8	<i>primo anno</i>	<i>Il Corso si prefigge di presentare la produzione di specie reattive dell'Ossigeno nell'organismo e la tossicità ad essa associata. Saranno studiati la struttura, l'attività e la regolazione degli enzimi NADPH ossidasi, NO sintetasi e Xantina ossidasi ed il loro coinvolgimento in condizioni fisiopatologiche. Saranno descritte le cause della produzione di specie radicaliche nella catena respiratoria e nel meccanismo di autoossidazione dell'emoglobina. Verranno presentati i meccanismi molecolari del danno ossidativo da radicali a membrane biologiche, proteine e</i>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>acidi nucleici. Infine saranno presentati i meccanismi di difesa cellulare enzimatica, il ruolo del glutatione come antiossidante ed i meccanismi di protezione delle vitamine E, A e C contro lo stress ossidativo.</i></p>			
2.	<p><i>Antibiotico-resistenza naturale ed evolutiva e sviluppo di nuove strategie antimicrobiche</i></p>	8	<p><i>primo anno</i></p>	<p><i>Gli antibiotici sono insieme ai vaccini uno dei pilastri su cui si basa la medicina moderna. Il fenomeno della resistenza agli antibiotici che limita o annulla l'efficacia di tali molecole, rappresenta un grave problema sanitario a livello globale. Le strategie per combattere l'antibiotico-resistenza sono diversificate e non esiste un'unica risposta. Il crescente aumento di patogeni con una resistenza critica agli antibiotici deve stimolare la ricerca verso lo sviluppo di molecole antimicrobiche con caratteristiche e meccanismi di azione diversi rispetto agli antibiotici convenzionali. Possibili alternative agli antibiotici convenzionali sono gli agenti-anti-virulenza o anti-infettivi; i peptidi antimicrobici naturali e derivati sintetici progettati con gli strumenti informatici e di intelligenza</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<i>artificiale. Il miglioramento dell'attività di antibiotici noti, attraverso lo sviluppo di sistemi di rilascio nano e micro o veicolazione con polimeri funzionalizzati rappresenta un'altra potenziale alternativa</i>			
3.	<i>Determinazione quali-quantitativa di biomolecole mediante tecniche ifenate di spettrometria di massa</i>	8	<i>primo anno</i>	<i>Descrizione delle tipologie di composti analizzabili e delle corrispondenti matrici; valutazione degli approcci strumentali; descrizione dei diversi tipi di spettrometri di massa per le determinazioni di biomolecole; tecniche di ionizzazione utilizzabili per l'analisi di biomolecole; sistemi di separazione cromatografica e loro integrazione con la strumentazione corrente; gestione dei dati ottenuti con accoppiamento di sistemi cromatografici con spettrometri di massa; librerie di spettri di massa; spettrometria di massa quantitativa - rivelazione selettiva degli ioni; metodi di preparazione del campione orientati all'analisi in spettrometria di massa: purificazione, estrazione e diluizione isotopica.</i>			<i>SI</i>
4.	<i>Meccanismo d'azione e metabolismo cellulare di</i>	8	<i>primo anno</i>	<i>Il Corso, rivolto agli studenti del dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari,</i>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
	<i>farmaci antitumorali a base di platino</i>			<p><i>consiste in una serie di lezioni frontali in cui verranno trattati i seguenti argomenti: Introduzione storica sull'importanza dei composti di platino come antitumorali nella pratica clinica. Dettagli sul meccanismo d'azione del cisplatino e dei suoi analoghi. Tumore e risposta immunitaria: "immunogenic cell death". Nuova generazione di composti di platino per la lotta contro il cancro. Composti di Pt(II) e Pt(IV): differenze strutturali e possibili applicazioni. Alternative "metal-based" nelle terapie antitumorali.</i></p>			
5.	<i>Nanoforme del Carbonio: generalità, funzionalizzazione e applicazioni in nanotecnologia.</i>	8	<i>primo anno</i>	<p><i>Verranno descritte le principali nanoforme del carbonio (fullereni, nanotubi a parete singola e parete multipla, nanocorni, nanocipolle, nanodiamanti e grafene), le tecniche per lo loro produzione, le metodologie per la loro funzionalizzazione covalente e supramolecolare, e le tecniche analitiche e spettroscopiche che si impiegano per caratterizzarli. Infine, verranno affrontate le applicazioni nanotecnologiche dei nanocarboni nell'ambito</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<i>dell'energia rinnovabile, della sensoristica, del drug delivery e della terapia fotodinamica del cancro (nanomedicina).</i>			
6.	<i>Applicazione dei metodi chemiometrici nella scoperta di farmaci</i>	8	<i>primo anno</i>	<p><i>Background teorico per l'utilizzo delle tecniche di analisi multivariata dei dati (PCA), tecniche di classificazione e modellamento di classe (in particolare LDA, QDA e SIMCA), tecniche di calibrazione multivariata (in particolare MLR e PLS). Applicazioni dell'analisi statistica multivariata ai dati chimici.</i></p> <p><i>Rappresentazione delle strutture 2D e 3D delle molecole di farmaco e delle proprietà ad esse associate. Sviluppo ed utilizzo di descrittori mono, bi e tridimensionali. Indici di similarità e diversità. Indici topologici. Modelli QSAR e 3D-QSAR, inclusi CoMFA (Comparative molecular field analysis), CoMSIA (Comparative Molecular Similarity Indices Analysis), HiQSAR (hierarchical quantitative structure-activity relationship), QMSA (quantitative molecular similarity analysis). Validazione dei modelli, applicazioni di modelli QSAR o 3D-</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<i>QSAR predittivi al Database Mining. Trasferimento dei dati chiave per la scoperta ed ottimizzazione dei lead compounds.</i>			
7.	<i>Ottimizzazione delle proprietà drug-like nel processo di Drug Discovery</i>	8	<i>primo anno</i>	<i>Il Corso sarà focalizzato sui principali approcci per modificare le strutture di nuove entità chimiche allo scopo di migliorarne le proprietà chimico-fisiche (pKa, lipofilia, solubilità, legami ad idrogeno) che possono avere un impatto sulle proprietà ADMET (assorbimento, distribuzione, metabolismo, escrezione, tossicità) e sul comportamento in vivo (stabilità metabolica, trasporto). Verranno presentati esempi che mostrano come la conoscenza derivante dallo studio delle relazioni struttura-proprietà possa aiutare a superare difetti nella farmacocinetica nello sviluppo di lead candidates.</i>			<i>SI</i>
8.	<i>Metodologie innovative nel drug discovery</i>	8	<i>primo anno</i>	<i>Scopo del Corso è fornire al dottorando una panoramica delle principali strategie sintetiche innovative utilizzate nel processo di drug discovery. In particolare, verranno discusse ed approfondite le nozioni teoriche fondamentali sulle quali si basano le principali tecniche sintetiche e le più</i>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>recenti metodologie (click chemistry, MW-assisted reactions, flow chemistry e green chemistry) analizzando vantaggi, limiti e precauzioni operative. Verranno inoltre presentati allo studente casi di studio, esplicativi delle potenzialità dei nuovi approcci sintetici nella scoperta di composti bioattivi.</i></p>			
9.	<p><i>Formulazioni inalatorie innovative per il trattamento di patologie polmonari e sistemiche</i></p>	8	<p><i>primo anno</i></p>	<p><i>Presentazione della via polmonare come potenziale via di somministrazione per il trattamento di patologie locali del polmone o sistemiche. Descrizione delle più recenti e innovative formulazioni inalatorie sviluppate per la somministrazione polmonare e sistemica di farmaci, descrizione dei potenziali vantaggi associati al loro uso come carrier di farmaci quali la riduzione dell'incidenza di effetti collaterali e, per le terapie sistemiche, la presenza di un'ampia superficie di assorbimento associato al by-pass dell'effetto di primo passaggio epatico. Presentazione di biomateriali adatti alla realizzazione di forme di dosaggio inalatorie innovative.</i></p>			<p><i>SI</i></p>
10.	<p><i>Alimenti e prodotti nutraceutici</i></p>	8	<p><i>primo anno</i></p>	<p><i>Il Corso di Alimenti e prodotti nutraceutici affronta gli aspetti chimici, dietetici di</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>alimenti nutraceutici. Vengono quindi considerate le tipologie di alimenti che presentano particolare interesse per la dieta mediterranea e/o per l'economia italiana .Vengono descritte le principali caratteristiche e norme alla base del controllo di qualità Di ogni alimento vengono considerati le caratteristiche nutrizionali, la composizione chimica, i trattamenti tecnologici comunemente impiegati per la conservazione e le analisi utili ad assicurarne la sicurezza (contaminanti) o l'inclusione in particolari categorie di qualità. Particolare attenzione verrà prestata allo studio sostanze xenobiotiche con cui gli alimenti entrano in contatto lungo tutta la filiera agroalimentare. Saranno valutate le interazioni tra dieta e stato di nutrizione finalizzate alla identificazione delle componenti degli alimenti e dei meccanismi fisiologici dell'organismo che contribuiscono al mantenimento di un buono stato di salute e alla prevenzione del rischio di patologie correlate all'alimentazione. Gli</i></p>			

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>approcci utilizzati comprendono studi ed interventi su gruppi di popolazione (ed es. bambini, adulti, anziani, sani o in particolari stati fisiologici), nonché studi su modelli animali e cellulari, con metodologie sperimentali che integrano tecniche biochimiche, microbiologiche, metagenomiche e molecolari. Particolare attenzione verrà posta al tema degli integratori alimentari e degli alimenti funzionali.</i></p>			
11.	<i>Banche dati, strumento chiave per la ricerca scientifica</i>	8	<i>primo anno</i>	<p><i>Il corso, rivolto agli studenti del dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari, si prefigge di fornire una panoramica approfondita delle principali banche dati disponibili e degli strumenti più efficaci per condurre ricerche e studi nelle diverse discipline del dottorato. Attraverso lezioni teoriche e sessioni pratiche, il corso introduce gli studenti alle metodologie di ricerca più avanzate, illustrando l'utilizzo ottimale delle banche dati per l'acquisizione, l'analisi e la gestione dei dati scientifici. Gli argomenti trattati includono l'identificazione e l'accesso alle fonti di informazione più affidabili, le tecniche</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>di ricerca avanzate, l'interpretazione e la presentazione dei risultati, nonché le best practice per la gestione etica dei dati. L'obiettivo principale del corso è dotare gli studenti delle competenze necessarie per condurre ricerche di alta qualità e per sfruttare appieno, nel contesto accademico e professionale, il potenziale delle moderne tecnologie informatiche (quali IRIS UniPA, Scifinder, Scopus, Scimago, ChemDraw, Biorender).</i></p>			
12	<p><i>Alimenti: intolleranze ed allergie alimentari</i></p>	8	secondo anno	<p><i>Il settore dell'alimentazione e della salute oggi è strettamente correlato all'impiego di diete alimentari specifiche e prodotti dietetici dedicati visto il sempre più frequente manifestarsi di allergie ed intolleranze alimentari. Se non fossero stati eseguiti studi dedicati per modificare opportunamente l'alimentazione alcune malattie avrebbero avuto un decorso molto negativo o talora fatale, se non fosse stata identificata la causa dietetica. La qualità dei prodotti alimentari oltre a presentare una corretta composizione e l'assenza di contaminanti, deve anche prevedere</i></p>			SI

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>quindi un attento controllo al fine di tutelare i soggetti allergici ed intolleranti anche nel caso di eventuali modifiche indotte dalle tecnologie impiegate nel processo di produzione. Verranno quindi esaminati le cause ed i meccanismi che differenziano le allergie e le intolleranze alimentari, l'identificazione e la caratterizzazione delle proteine allergeniche all'interno delle fonti alimentari, i meccanismi d'azione sottostanti e le opzioni di trattamento. Facendo riferimento alle linee guida normative e legislative inerenti, si valuteranno le ipotesi sui trattamenti per le allergie alimentari, le metodologie da utilizzare per la messa a punto di prodotti destinati alle specifiche diete con l'utilizzo di quei prodotti alimentari che oggi vengono denominati "dietoterapici" o "dietoterapeutici". Si tratteranno anche i progressi nella diagnosi, le teorie immunochimiche ed i meccanismi molecolari in uso, l'immunoterapia e le metodiche analitiche di controllo su questi alimenti</i></p>			

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p>“dietoterapici” o “dietoterapeutici”. Saranno inoltre curati gli aspetti clinici dell'allergia alimentare ed il ruolo dei modelli animali nel progresso della ricerca sulle allergie alimentari, gli effetti della lavorazione degli alimenti sull'allergenicità ed i metodi per la preparazione di alimenti ipoallergenici. Un focus specifico verrà dedicato alle allergie alimentari da latte, frumento ed alla celiachia.</p>			
13.	<i>Dalla biologia degli invertebrati marini alle molecole bioattive</i>	8	<i>secondo anno</i>	<p>L'attività formativa descriverà un percorso che, partendo dalla conoscenza degli invertebrati marini e della loro biologia, arrivi all'isolamento, caratterizzazione chimica e biologica delle molecole bioattive. Si forniranno cenni di sistematica e filogenesi, adattamenti all'ambiente, il sistema immunitario e comportamento dei seguenti gruppi animali: Poriferi, Celenterati, Molluschi, Anellidi, Echinodermi e Tunicati. Si illustrerà lo stato dell'arte nella bioprospezione di molecole bioattive in questi animali e le loro applicazioni.</p>			<i>SI</i>
14.	<i>Biochimica del Cancro I</i>	8	<i>secondo anno</i>	<i>Il Corso si propone di incrementare e</i>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>approfondire le conoscenze sui meccanismi molecolari della regolazione del ciclo cellulare degli eucarioti e l'azione degli agenti cancerogeni chimici, fisici e biologici. Saranno approfonditi i ruoli degli oncogeni e oncosoppressori nelle fasi di sviluppo di un tumore. Particolare attenzione sarà anche rivolta ai percorsi di morte cellulare programmata e ai meccanismi di resistenza. Infine, concludono il Corso le metodologie impiegate per la caratterizzazione e lo studio delle cellule staminali cancerose.</i></p>			
15.	<i>La chimica dei composti organometallici di oro</i>	8	<i>secondo anno</i>	<p><i>Il Corso, rivolto agli studenti del dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari, consiste in un excursus sull'utilizzo di composti organometallici di oro (I) e oro (III) in differenti ambiti, dalla catalisi alle applicazioni biomediche. Dopo una introduzione sulla chimica dell'oro (I) e oro (III) e cenni storici sull'utilizzo dei loro complessi, saranno discussi alcuni case study sul meccanismo di azione ex celluloso ed in celluloso di complessi di oro(I)-NHC (N-heterocyclic carbenes) con leganti simil-caffeina.</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>Similmente, verranno affrontati i challenges sintetici e nuovi approcci per la preparazione di composti ciclotallati di oro (III). In ultimo verranno presentati ulteriori case studies sull'uso in catalisi di organometalli di oro (III) per reazioni di cross coupling C-P, C-C e C-S e loro potenziale applicazione in terapia.</i></p>			
16.	<p><i>Sostenibilità ed economia circolare: concetti di Base</i></p>	8	<p><i>secondo anno</i></p>	<p><i>La finalità del Corso è quello di fornire concetti di base di sostenibilità ed economia circolare. Saranno analizzati tutti quei fattori che possono influire sul decorso di processi chimici e biochimici e le azioni che possono essere messe in atto allo scopo di minimizzare l'impatto che gli stessi possono avere sull'ambiente. Saranno presentati alcuni approcci che, combinando i parametri di processo, consentiranno di valutare l'ecosostenibilità degli stessi. In particolare, saranno prese in considerazione le applicazioni di tali approcci in alcuni comparti industriali di interesse. Il Corso non prevede una verifica finale, ma si tenterà di stimolare la discussione tra i</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<i>partecipanti, durante le attività seminariali.</i>			
17.	<i>Tecniche in silico nella progettazione e sviluppo dei farmaci</i>	8	<i>secondo anno</i>	<i>Introduzione all'uso dell'intelligenza artificiale e del "drug repurposing" attraverso l'approccio ML (machine learning) in chimica farmaceutica. Progettazione dei farmaci attraverso i metodi "Ligand-based" (approccio farmacoforico), "Structure-based" (homology modelling, incluse le varie tecniche di docking,), "Fragment-Based". Dinamica Molecolare. Metodi semiempirici, quanto-meccanici, DFT (teoria del funzionale di densità), metodi ibridi QM/MM. Accuratezza e applicabilità dei metodi quanto-chimici in chimica farmaceutica. Esempi di applicazione di modellazione tridimensionale di strutture dei recettori e dei farmaci per lo studio delle interazioni farmaco-recettore e lo sviluppo di nuovi farmaci.</i>			<i>SI</i>
18.	<i>Strategie di medicina di precisione come approccio terapeutico nella targeted therapy</i>	8	<i>secondo anno</i>	<i>Scopo del Corso è di fornire una base sulle principali tecniche sintetiche, metodi biostrutturali e biofisici come tool di rilievo per stabilire la "druggability" di target specifici. Tale approccio è volto all' identificazione di lead candidates quali</i>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>ligandi ad alta specificità e alla individuazione di requisiti strutturali utili al processo di drug discovery verso targets di rilevanza terapeutica. Verranno analizzati casi di studio tra i quali gli inibitori di interazioni proteina-proteina (PPI).</i></p>			
19.	<p><i>Radiofarmaci per il trattamento del cancro</i></p>	8	<p><i>secondo anno</i></p>	<p><i>Il Corso ha l'obiettivo di fornire le conoscenze sullo sviluppo di farmaci di medicina nucleare che trovano applicazione in ambito diagnostico e terapeutico. La terapia radiometabolica è infatti largamente utilizzata nel trattamento di diverse forme tumorali e la coniugazione di radiofarmaci con anticorpi monoclonali permette di avere composti ad azione specifica. Il corso approfondirà i seguenti argomenti: Radioattività e concetti generali. Sviluppo di radiofarmaci in medicina nucleare, radiodiagnostica e terapia, preparazione di radiofarmaci, controllo della qualità dei radiofarmaci. Uso terapeutico.</i></p>			<p><i>SI</i></p>
20.	<p><i>Biomateriali e sistemi per la nanomedicina</i></p>	8	<p><i>secondo anno</i></p>	<p><i>Caratteristiche generali dei biomateriali per la produzione di nanosistemi per la veicolazione di farmaci.</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>Caratteristiche biofarmaceutiche, proprietà superficiali e strutturali delle nanomedicine. Biomateriali per la realizzazione di nanoparticelle, micelle polimeriche, complessi interpolielettrolitici, aggregati supramolecolari, coniugati polimero-farmaco, . Nanostrutture polimeriche per la veicolazione di farmaci di natura proteica. Biomateriali e nanosistemi per la veicolazione di materiale genico.</i></p>			
21.	<i>Biomateriali innovativi per impianti biomedicali</i>	8	<i>secondo anno</i>	<p><i>Il progressivo aumento della popolazione anziana richiede che la ricerca scientifica in ambito biomedico debba tenere conto delle nuove necessità di carattere sociale volte al miglioramento della qualità della vita. In questo contesto, i biomateriali per impianti biomedicali stanno assumendo una crescente importanza e dovranno garantire prestazioni sempre migliori. Alla luce di questi importanti sviluppi ed interessi obiettivo del Corso sarà quello di sviluppare i seguenti aspetti: Biomateriali. Definizioni, proprietà e funzioni. Biocompatibilità. Biotossicità. Biomateriali inerti.</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>Biomateriali bioattivi. Biomateriali biodegradabili. Classificazione dei biomateriali: naturali, polimerici, metallici, ceramici e compositi. Applicazioni in campo biomedico dei biomateriali e problematiche connesse. Esempi di scaffold polimerici per la rigenerazione di tessuti.</i></p>			
22.	<p><i>Anticorpi monoclonali in ambito biofarmaceutico</i></p>	8	<p><i>Secondo anno</i></p>	<p><i>Gli anticorpi monoclonali, grazie alla loro incomparabile specificità nei confronti del target antigenico, sono attualmente considerati preziosi strumenti in campo farmaceutico sia da soli che coniugati con sostanze attive quali farmaci, radioisotopi o tossine. L'associazione di un farmaco ad un anticorpo monoclonale consente la sua veicolazione direttamente al sito d'azione, con significativi vantaggi in termini di tollerabilità del trattamento terapeutico. Il corso prevede l'approfondimento dei seguenti argomenti: Produzione, struttura e funzioni degli anticorpi monoclonali. Anticorpi chimerici, umanizzati ed umani. Anticorpi monoclonali coniugati chimicamente con</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>molecole biologicamente attive e con enzimi attivatori di profarmaci. Anticorpi radioconiugati. Applicazioni terapeutiche e utilizzo nella diagnostica clinica.</i></p>			
23.	<p><i>Meccanismi di trasduzione del segnale redox-dipendenti e processi dismetabolici</i></p>	8	<p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>Il Corso mira alla descrizione dei meccanismi di biosegnalazione redox dipendenti di natura infiammatoria, alla base di processi dismetabolici correlati all'insulino-resistenza. A tale scopo, verranno analizzate le modalità attraverso cui un overload calorico cronico genera l'attivazione redox-dipendente dei processi di trasduzione del segnale in cellule dell'immunità innata ed adattativa. Saranno, inoltre, descritti i meccanismi attraverso cui l'instaurarsi di una infiammazione cronica e sistemica determina una condizione di insulino-resistenza sia nei principali organi responsabili dell'omeostasi energetica che nel sistema nervoso centrale.</i></p>			<p><i>SI</i></p>
24.	<p><i>Biochimica del Cancro II</i></p>	8	<p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>Il Corso si propone di offrire un'analisi dei tratti distintivi delle cellule tumorali (hallmarks del cancro) e dei cambiamenti metabolici che si verificano nella</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>cancerogenesi. Un aspetto particolare del corso riguarderà lo studio della riprogrammazione metabolica e degli oncometaboliti nel cancro: saranno analizzati i pathway metabolici convenzionali che sono potenziati o soppressi nelle cellule tumorali. Inoltre, verrà approfondito il ruolo degli oncogeni e degli oncosoppressori nel controllo del metabolismo della cellula cancerosa, nonché gli adattamenti metabolici e molecolari all'ipossia tumorale.</i></p>			
25.	<p><i>High Performance Computing (HPC) per lo studio strutturale e dinamico di sistemi molecolari e biomolecolari complessi</i></p>	8	<p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>Obiettivo del Corso è mostrare le potenzialità delle infrastrutture per il calcolo scientifico ad alte prestazioni (chiamate comunemente supercomputers) e come vengono usate nella moderna ricerca scientifica. Il Corso, rivolto a tutti gli studenti del dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari, consiste in una serie di lezioni frontali di 6 ore e una sessione di tutorial di 2 ore. Non sono necessarie competenze preliminari in ambito computazionale. Gli argomenti trattati saranno: Lezioni Frontali: che cos'è e perché</i></p>			SI

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>abbiamo bisogno di un'infrastruttura per il calcolo scientifico (HPC). Introduzione ai supercomputer italiani del CINECA e ai metodi in silico. Brevi cenni teorici sulla Dinamica Molecolare (MD) e sull'utilizzo del software GROMACS. Esempi di applicazioni HPC moderne: i) Dalle applicazioni "classiche" al machine learning; ii) Studio dei meccanismi molecolari alla base della carcinogenesi; iii) Combattere la pandemia di COVID-19 con i supercomputer. Sessione di Tutorial: connessione ai supercomputers MARCONI100 e GALILEO100 del CINECA, lancio e analisi di una simulazione MD. Come ottenere l'accesso a queste risorse computazionali: consigli sulla stesura di un progetto IS CRA.</i></p>			
26.	<p><i>Metodi chimico-quantistici: un'introduzione allo studio computazionale di struttura, proprietà e reattività di composti chimici</i></p>	8	<p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>Il Corso, rivolto a tutti gli studenti del dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari, consiste nella trattazione dei seguenti argomenti mediante lezioni frontali: Breve introduzione alla chimica computazionale. La chimica quantistica e</i></p>			SI

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p>la "teoria del funzionale densità" (DFT). Geometria molecolare e (iper)superficie di energia potenziale. Struttura molecolare e proprietà spettroscopiche vibrazionali ed elettroniche. Struttura e reattività: intermedi e stati di transizione. Esempi di applicazioni presi dalla letteratura scientifica recente.</p>			
27	<i>Approccio alla Comunicazione Scientifica</i>	8	<i>terzo anno</i>	<p>Il Corso intende offrire i fondamenti teorici e pratici della divulgazione scientifica producendo una panoramica sistematica degli strumenti utili a trasmettere efficacemente il sapere scientifico alla società (public engagement). Il corso consentirà agli studenti di potenziare le proprie competenze di base per la comunicazione scientifica acquisendo tecniche alle quali ricorrere nel processo di redazione di un abstract, un report tecnico, un articolo per una rivista specializzata o di una proposta progettuale.</p>			<i>SI</i>
28.	<i>Repositioning of natural products in drug discovery</i>	8	<i>terzo anno</i>	<p>Scopo del Corso sarà lo sviluppo e l'applicazione di metodologie innovative per il "riposizionamento" di prodotti naturali, o più in generale di prodotti ispirati dalla natura, nella scoperta</p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>di nuovi farmaci. In particolare, saranno oggetto del corso la caratterizzazione e lo sviluppo di prodotti naturali farmacologicamente attivi, l'analisi delle relazioni struttura - attività e le procedure di screening sia in silico che attraverso tecniche di HTS (High-throughput screening) per la scoperta di molecole bioattive naturali o "nature-inspired". Verranno inoltre presentati allo studente casi di studio basati sul repositioning di prodotti naturali e l'identificazione di nuovi target biologici</i></p>			
29.	<p><i>Sviluppo di nuove small molecules per la terapia oncologica mirata</i></p>	8	<p><i>terzo anno</i></p>	<p><i>Il Corso si prefigge di illustrare lo sviluppo recente di nuovi farmaci selettivi impiegati nella targeted therapy oncologica. L'impiego di molecole ad azione selettiva in terapia ha il vantaggio di ridurre significativamente gli effetti collaterali rispetto ai farmaci della terapia tradizionale, aumentando la compliance del paziente. Tali trattamenti sono infatti individualizzati e scelti solo dopo l'analisi istologica del tipo di tumore. Il corso tratterà i principali argomenti: Meccanismi della Targeted therapy nel</i></p>			<p><i>SI</i></p>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<p><i>cancro e differenze con la terapia convenzionale, principali classi ad azione selettiva: inibitori chinasi, inibitori dell'espressione genica, inibitori del proteasoma. Farmaci innovativi: modulatori dell'interazione proteina-proteina, sviluppo di farmaci con strategia PROTAC. Impiego in clinica.</i></p>			
30.	<i>Nanotecnologie per la teranostica</i>	8	<i>terzo anno</i>	<p><i>Introduzione del concetto di teranostica e caratteristiche generali di un sistema teranostico in vari ambiti della medicina. Caratteristiche biofarmaceutiche, proprietà chimico-fisiche, superficiali e ottiche dei nanosistemi per bio-imaging e drug delivery. Nanotecnologie per il rilascio pulsato di farmaci assistito da immagini. Nanotecnologie come antitumorali per medicina di precisione : funzionalizzazione superficiale con ligandi specifici, monitoraggio e modulazione del microambiente tumorale, sinergia chemio-fototermica guidata da remoto . Biomateriali per la realizzazione di nanosistemi teranostici, tra cui: quantum dots, carbon dots, nanoparticelle di</i></p>			<i>SI</i>

n.	Denominazione dell'insegnamento	Numero di ore totali sull'intero ciclo	Distribuzione durante il ciclo di dottorato (anni in cui l'insegnamento è attivo)	Descrizione del corso	Eventuale curriculum di riferimento	Per i dottorati nazionali: percorso formativo di elevata qualificazione	Verifica finale
				<i>oro, nanoparticelle superparamagnetiche, sistemi nanostrutturati ibridi carbonio/metallo. Nanostrutture per gene-editing guidato da immagini.</i>			

Altre attività DIDATTICHE (seminari, attività di laboratorio e di ricerca, formazione interdisciplinare, multidisciplinare e transdisciplinare). Max 20 CFU/anno

Tipo di attività	Descrizione dell'attività (e delle modalità di accesso alle infrastrutture per i dottorati nazionali)
Perfezionamento linguistico	Al fine di potenziare le competenze linguistiche dei Dottorandi, vengono svolti in lingua inglese dei seminari su argomenti inerenti le tematiche del dottorato di ricerca in Scienze Molecolari e Biomolecolari. I Dottorandi inoltre sono tenuti a seguire almeno un corso di lingua straniera erogato dal Centro Linguistico di Ateneo (CLA) dell'Università degli Studi di Palermo. Sempre il CLA fornisce corsi di italiano aperti agli studenti stranieri del corso di dottorato. Il Dottorando avrà così la possibilità di acquisire strumenti e competenze linguistiche che gli consentiranno di sviluppare capacità di comunicazione adatte a lavorare in team e a condividere i risultati delle ricerche anche in presenza di un pubblico internazionale.
Perfezionamento informatico	Si prevede l'organizzazione di seminari teorico-pratici destinati ai Dottorandi che frequentano i Corsi di Dottorato di Ricerca presso l'Università degli Studi di Palermo, volti all'acquisizione e al potenziamento delle loro competenze informatiche necessarie per la gestione e l'utilizzo di software comunemente utilizzati per la presentazione in formato elettronico dei risultati raggiunti e per l'analisi statistica dei dati sperimentali. Esercitazioni pratiche risulteranno particolarmente utili per rafforzare e verificare le competenze acquisite.

Tipo di attività	Descrizione dell'attività (e delle modalità di accesso alle infrastrutture per i dottorati nazionali)
Gestione della ricerca e della conoscenza dei sistemi di ricerca europei e internazionali	Si prevede l'organizzazione di corsi di formazione da parte dell'Università degli Studi di Palermo, anche tramite la Scuola di Dottorato dell'Università di Palermo, in collaborazione con il Gruppo di lavoro sulla Carta Europea dei Ricercatori nell'ambito del Progetto della Commissione Europea: "Human Resource Strategy for Researchers (HRS4R)". Si tratta di uno strumento nuovo con un approccio 'bottom-up' di supporto per le istituzioni di ricerca europee. L'Università di Palermo è una delle prime 40 istituzioni europee che vi ha aderito ed ha ricevuto nel marzo 2010 un riconoscimento della Commissione Europea per i progressi ottenuti nell'ambito della Strategia delle risorse umane per i ricercatori (https://www.unipa.it/amministrazione/direzionegenerale/serviziospecialericercadiateneo/u.o.promozioneeeorganizzazioneeeventiperlaricarta_2/). I suddetti corsi, destinati ai Dottorandi che frequentano i Corsi di Dottorato di Ricerca presso l'Università degli Studi di Palermo, consentiranno agli stessi di acquisire informazioni sui sistemi di ricerca nazionali ed internazionali, sulle opportunità di finanziamento della ricerca e sulla mobilità dei ricercatori a livello europeo.
Valorizzazione e disseminazione dei risultati, della proprietà intellettuale e dell'accesso aperto ai dati e ai prodotti della ricerca	Tramite la Scuola di Dottorato dell'Università di Palermo, si prevede l'organizzazione di corsi e/o seminari destinati ai Dottorandi che frequentano i Corsi di Dottorato di Ricerca presso l'Ateneo di Palermo sulla valorizzazione dei risultati della ricerca. Si prevedono seminari sugli indici bibliometrici, sui parametri utilizzati dalla comunità internazionale per la valutazione dell'attività scientifica e sulla valorizzazione dei prodotti della ricerca. Altrettanto importanti risulteranno essere seminari riguardanti la comunicazione scientifica al pubblico, la brevettazione nazionale ed internazionale, il trasferimento tecnologico e la tutela della proprietà intellettuale e industriale. Altri seminari riguarderanno le modalità di deposito dei prodotti della ricerca nell'archivio digitale di Ateneo e il funzionamento dell'archivio stesso nonché training sulle principali banche dati bibliografiche consultabili online.
Seminari	I Dottorandi seguiranno seminari ad hoc organizzati, pertinenti sia tematiche di interesse comune sia specifici aspetti correlati a particolari progetti di ricerca in atto. Tali seminari consentiranno un approfondimento delle conoscenze relative agli ambiti di interesse dei Dottorandi stessi. Saranno inoltre coinvolti nel seguire seminari organizzati nell'ambito delle attività curriculari dei Corsi di Laurea pertinenti il Dottorato in Scienze Molecolari e Biomolecolari. Inoltre il Collegio del Dottorato può segnalare tramite la pagina web del Corso e/o del Dipartimento sede amministrativa, seminari di volta in volta individuati come idonei e coerenti con la formazione dei Dottorandi in Scienze Molecolari e Biomolecolari.
Attività presso Infrastrutture di	I Dottorandi seguiranno attività seminariali e di "training in the lab" all'interno dei laboratori di ATeN Center – Advanced Technologies

Tipo di attività	Descrizione dell'attività (e delle modalità di accesso alle infrastrutture per i dottorati nazionali)
ricerca	<p>Network Center – dell'Università degli Studi di Palermo, uno tra i pochi centri di ricerca e sviluppo in Europa nel settore delle Biotecnologie applicate alla salute dell'uomo, in grado di offrire la disponibilità di una filiera che va dalla sintesi dei materiali fino ai test in vivo.</p> <p>ATeN Center è un'infrastruttura di ricerca di rilevanza regionale (Decreto Ministeriale n. 1082 del 10.09.2021 – PNIR 2021-2027) e all'interno della stessa sono erogate ai dottorandi attività seminariali volte ad implementare le conoscenze scientifico- tecnologiche degli stessi su tematiche di caratterizzazione di biomateriali, biomolecole e dispositivi di interesse generale quali: Microscopia a fluorescenza, Microscopia elettronica, Microscopia a Forza Atomica, Spettroscopia Fotoelettronica ai raggi X, Microscopia Raman, Spettroscopia a Pump/Probe al femtosecondo, Spray Drying, Stampa 3D, Analisi in vivo su modelli animali e Zebrafish.</p> <p>La fruizione di tali seminari/training teorico – pratici da parte dei dottorandi ha l'obiettivo di implementare le loro abilità di applicare, nelle loro ricerche, tecnologie di indagine avanzate.</p>
Principi fondamentali di etica, uguaglianza di genere e integrità	<p>Tramite la Scuola di Dottorato dell'Università di Palermo, si prevede l'organizzazione di seminari, destinati ai Dottorandi che frequentano i Corsi di Dottorato di Ricerca presso l'Ateneo di Palermo, per far conoscere agli stessi i principi etici della comunità accademica, le norme comportamentali durante il servizio, i doveri istituzionali nello svolgimento delle attività di ricerca, gli obblighi di comportamento specifici degli studenti. Verranno anche illustrate le azioni a sostegno dell'inclusione, delle pari opportunità, della parità di trattamento e del rispetto dei diritti individuali.</p>

- I dottorandi e le dottorande verranno stimolati a partecipare, pure in qualità di relatori e relatrici, a congressi e/o workshop e/o scuole di formazione nazionali/internazionali.
- I dottorandi e le dottorande verranno stimolati a progettare, realizzare e divulgare autonomamente programmi di ricerca e/o innovazione, grazie anche al supporto del tutor assegnato
- Viene favorita la mobilità dei dottorandi e dottorande presso altre sedi, comprese sedi estere (in media 6 mesi all'estero per ciascun dottorando), per lo svolgimento di attività sperimentali inerenti il progetto di ricerca del Dottorando (anche attraverso co- tutelate e Doctor Europeus), grazie anche al supporto degli Uffici dell'Ateneo e alle risorse dedicate.
- Il Corso di Dottorato consente e favorisce la partecipazione dei dottorandi e delle dottorande ad attività didattiche, purchè compatibili con le attività di ricerca svolte e previa autorizzazione da parte del Collegio dei Docenti, come di seguito indicato:

Attività dei dottorandi per il Ciclo 40

È previsto che i dottorandi possano svolgere attività di tutorato	NO
È previsto che i dottorandi possano svolgere attività di didattica integrativa	SI max 30

	ore
E' previsto che i dottorandi svolgano attività di terza missione?	SI max 30 ore

Si specifica che per le attività di terza missione per i Dottorandi deve essere ESCLUSO il CONTO TERZI

- Il Corso di Dottorato garantisce che la ricerca svolta dai dottorandi e dalle dottorande generi prodotti riconducibili al dottorando e alla dottoranda e che tali prodotti vengano adeguatamente resi accessibili nel rispetto dei meccanismi di protezione intellettuale.