

**DOTTORATO IN INGEGNERIA DEI PRODOTTI E DEI PROCESSI
INDUSTRIALI**

Ciclo 37°

Research themes

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	PIATTAFORME PER IL TRATTAMENTO E LA DIAGNOSI BIOMEDICALE DI CELLULE CIRCOLANTI DEL SISTEMA IMMUNITARIO
Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	SVILUPPO SOSTENIBILE DI MATERIALI NANOSTRUTTURATI PER LA CATTURA DI SPECIE INQUINANTI E/O PROCESSI DI ENERGY STORAGE
Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	PHYSICAL FOAMING OF FOOD
Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	ENGINEERING PRECISION NANOPARTICLES FOR DRUG DELIVERY
Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	BIOMATERIALI
Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	MODELING AND SIMULATION OF EXTRUDATE SWELL OF COMPLEX MATERIALS
Ingegneria Chimica & Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	ANOMALIE NELLA DINAMICA DI SISTEMI POLIMERICI
Ingegneria Chimica & Ingegneria dei Materiali e delle Strutture	NEW USE OF COMBUSTION BY-PRODUCTS FOR SYNTHESIS OF NANOSTRUCTURED MATERIALS FOR GASEOUS AND PARTICLE POLLUTANT REMOVAL
Ingegneria Chimica & Tecnologie e Sistemi di produzione	STUDIO, SVILUPPO E CARATTERIZZAZIONE DI PROCESSI DI PRODUZIONE ADDITIVA AVANZATA DI MANUFATTI A GEOMETRIA COMPLESSA REALIZZATI IN SCHIUME POLIMERICHE RINFORZATE CON FIBRE
Ingegneria Chimica	NOVEL PROCESS FOR GREEN H2 PRODUCTION

Ingegneria Chimica	FLUID DYNAMICS OF PARTICLE VISCOELASTIC SUSPENSIONS THROUGH CFD-DEM METHODS
Ingegneria Chimica	IDROGELI PER BIO-STAMPA TRIDIMENSIONALE
Ingegneria Chimica	APPLICATION OF CHEMI-ELECTRO-HYDRODYNAMIC ATOMIZATION (CEHDA) TO CHEMICAL PROCESS DESIGN
Ingegneria Chimica	EFFICIENT CO ₂ CAPTURE AND METHANATION
Ingegneria Chimica	DETERMINATION OF THE ENHANCEMENT FACTOR AND OF THE SIZE DISTRIBUTION FOR SECONDARY PM FORMED DURING ATMOSPHERIC AGING OF GASOLINE AND DIESEL VEHICLE EXHAUSTS
Ingegneria Chimica	INQUINAMENTO ATMOSFERICO E SVILUPPO SOSTENIBILE DEL CENTRO STORICO DI NAPOLI
Ingegneria Chimica	LA PRODUZIONE DI ALIMENTI FUNZIONALI PER VIA BIOTECNOLOGICA
Ingegneria Chimica	FAST DYNAMICS OF LINEAR AND BRANCHED WORMLIKE MICELLAR SOLUTIONS
Ingegneria Chimica	SVILUPPO DI NANOMATERIALI MAGNETICI GREEN PER LA DEPURAZIONE DI ACQUE REFLUE
Ingegneria Chimica	ADVANCED SORPTION-ENHANCED PROCESSES IN FLUIDIZED BED REACTORS
Ingegneria Chimica	COKE, SOOT, AND INTERSTELLAR CARBON DUST: OPTOELECTRONIC SIGNATURES OF NANO-CARBON AND POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN THE PRESENCE OF H ATOMS
Ingegneria Chimica	CHEMICO-PHYSICAL ANALYSIS OF COMBUSTION-FORMED CARBONACEOUS PARTICLE FEATURES AND THEIR CORRELATION TO FUEL STRUCTURE FOR RENEWABLE AND ALTERNATIVE FUELS
Ingegneria Chimica	CYBER-INFRASTRUTTURE CLOUD EMBEDDED PER IL CONTROLLO E L'OTTIMIZZAZIONE DI PROCESSI INNOVATIVI DI CONVERSIONE TERMOCHIMICA

Ingegneria Chimica	SVILUPPO E APPLICAZIONE DI METODOLOGIE DI "SENSING" AVANZATO PER IL CONTROLLO E LA DIGITALIZZAZIONE VIRTUALE DI PROCESSI REATTIVI.
Ingegneria Chimica	ANALISI DEL TRASPORTO SANGUIGNO IN CONDIZIONI MICROCONFINATE PER APPLICAZIONI BIOMEDICHE
Ingegneria Chimica	MODELING AND SIMULATION OF EXTRUDATE SWELL OF COMPLEX MATERIALS
Ingegneria Chimica	RUOLO DELLE CONDIZIONI AMBIENTALI SULLA MOTILITÀ BATTERICA E SULLA FORMAZIONE DI BIOFILM
Tecnologie e Sistemi di Produzione	SALDATURA 4.0
Tecnologie e Sistemi di Produzione	SISTEMI DI CONTROLLO AUTOMATIZZATO CON LIQUIDI PENETRANTI NELLA FABBRICAZIONE DI STRUTTURE AERONAUTICHE
Tecnologie e Sistemi di Produzione	INTELLIGENT SENSOR MONITORING FOR SMART SUPPORT SYSTEMS TO ENHANCE MANUFACTURING PROCESS SUSTAINABILITY IN MACHINING TECHNOLOGIES
Tecnologie e Sistemi di Produzione	STUDIO DELLA SOSTENIBILITÀ DEL PROCESSO DI FRICTION STIR WELDING PER LA GIUNZIONE DI LEGHE LEGGERE INNOVATIVE

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof. Filippo Causa
Prof. David Dannhauser

Supporting information:

- Dr Giuseppe Terrazzano, Dipartimento di Scienze, Università degli Studi della Basilicata
- Dr Luigi Buonaguro, Istituto Nazionale Tumore "Fondazione G Pascale"
- Prof Federica Caselli, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ingegneria informatica, Università di Tor Vergata,
- Dr Stefano Pagliara, University of Exeter, Senior Lecturer in Biomicrofluidics
- Dr. Oliver Otto, University of Greifswald, Leader del Biomechanics Laboratory

Il dottorando potrà trascorrere un eventuale periodo all'estero nel gruppo

PIATTAFORME PER IL TRATTAMENTO E LA DIAGNOSI BIOMEDICALE DI CELLULE CIRCOLANTI DEL SISTEMA IMMUNITARIO

A causa del ruolo essenziale delle cellule T e dei monociti nel sistema immunitario adattativo, sono stati ampiamente studiati come attori principali nell'immunologia sperimentale. Una nuova frontiera per l'immunoterapia del cancro è rappresentata da CAR-T e CAR-M, una versione ingegnerizzata di cellule T e monociti attivati: le cellule immunitarie autologhe del paziente sono geneticamente modificate per esprimere i recettori dell'antigene chimerico (CAR), in grado di potenziare la specificità dell'antigene, reindirizzare le cellule immunitarie verso antigeni sovra espressi nei tumori [1-2] quando reinfusi nel paziente [3]. È ben noto che le cellule T migrano verso i siti di infezione deformando le loro forme, interagiscono con le loro APC bersaglio, esaminano i loro antigeni, riorientano i loro organelli cellulari e rilasciano citochine per mediare le risposte immunitarie antigene-specifiche. Tutti questi passaggi richiedono e coinvolgono forze meccaniche, però, il ruolo e l'importanza di tali forze meccaniche necessitano di ulteriori studi [4].

È stato dimostrato che l'attività delle cellule T e B è sensibile alle forze fisiche e a segnali meccanici [5]. Ad esempio, la rigidità del substrato utilizzato per immobilizzare i ligandi stimolatori delle cellule T e B è risultata essere un parametro importante e precedentemente non riconosciuto che influenza l'attivazione, la proliferazione e la differenziazione cellulare [6-8], suggerendo una dipendenza dal processo di attivazione non solo da segnali chimici, ma anche meccanici. Non è ancora stato riportato l'effetto di sollecitazione in flusso nei riguardi della fisiopatologia di tali cellule.

D'altro canto, i processi attraverso i quali altre cellule percepiscono e reagiscono ai carichi esterni e convertono il segnale in una cascata di eventi biochimici, rispettivamente il mechano-sensing e mechano-transduction, sono alla base di molti processi fisiologici e fisiopatologici [9] e danno origine ai valori caratteristici (biomarcatori fisici o meccanici) che vengono utilizzati per studiare i singoli tipi cellulari [10-12]. Nel caso di cellule del sistema immunitario è ben nota, però, la possibilità di ottenere una signature di identificazione cellulare attraverso sistemi di acquisizione ottica label-free di parametri fisici di singole cellule in flusso [13-14]. Su queste basi, in questa proposta, si vogliono sviluppare piattaforme microfluidiche con lettura ottica per lo studio delle condizioni di sollecitazione sull'attivazione di cellule del comparto immunitario e per la relativa tipizzazione biofisica o biomeccanica.

Trattamento

Saranno progettati e realizzati dispositivi microfluidici capaci di indurre livelli controllati di stress in differenti contesti biochimici per valutare l'attivazione delle cellule del comparto immunitario ed in particolare le cellule T. L'implementazione di livelli di stress controllato sarà effettuato attraverso metodiche che comprenderanno l'utilizzo di fluidi

di ricerca del Dr
Stefano Pagliara o del
Dr Oliver Otto

viscoelastici o condizioni di flusso estensionale opportunamente progettati in sistemi microfluidici. L'obiettivo di questa parte di progetto sarà quello di investigare le migliori condizioni microfluidiche per l'attivazione delle cellule immunitarie in combinazione o in sostituzione delle attuali metodiche.

Diagnosi

Saranno sviluppati inoltre sistemi microfluidici per l'acquisizione di parametri fisici e meccanici di cellule attraverso misure di light-scattering con l'obiettivo di valutare l'attivazione immunitaria e provvedere ad una classificazione del fenotipo cellulare risultante. In particolare, saranno testati lo sviluppo e l'implementazione di algoritmi di machine learning per l'analisi dei parametri ottenuti (fisici e meccanici), per una possibile classificazione in tempo reale di cellule immunitarie. Tale attività potrà essere utilizzata sia per cellule del sistema immunitario sia attive che non attivate per un approccio più produttivo ed economico rispetto agli attuali standards nella identificazione cellulare.

1. Miliotou AN, Papadopoulou LC. CAR T-cell Therapy: A New Era in Cancer Immunotherapy. *Curr Pharm Biotechnol.* 2018;19(1):5-18.
2. Klichinsky M, Ruella M, Shestova O, Lu XM, Best A, Zeeman M, Schmierer M, Gabrusiewicz K, Anderson NR, Petty NE, Cummins KD, Shen F, Shan X, Veliz K, Blouch K, Yashiro-Ohtani Y, Kenderian SS, Kim MY, O'Connor RS, Wallace SR, Kozlowski MS, Marchione DM, Shestov M, Garcia BA, June CH, Gill S. Human chimeric antigen receptor macrophages for cancer immunotherapy. *Nat Biotechnol.* 2020 Aug;38(8):947-953.
3. Kool Mirjam, Caroline E. Broos Chapter 3 - Immunological Manifestations in Sarcoidosis
4. Harrison Devin L., Fang Yun, Huang Jun. T-Cell Mechanobiology: Force Sensation, Potentiation, and Translation. *Frontiers in Physics Vol. 7;* 2019
5. Upadhyaya A. Mechanosensing in the immune response. *Semin Cell Dev Biol.* 2017; 71:137-145.
6. Substrate Rigidity Regulates Human T Cell Activation and Proliferation. Roddy S. O'Connor, Xueli Hao, Keyue Shen, Keenan Bashour, Tatiana Akimova, Wayne W. Hancock, Lance C. Kam and Michael C. Milone. *J Immunol August 1, 2012, 189 (3) 1330-1339;*
7. Saitakis, Michael, et al. Different TCR-induced T lymphocyte responses are potentiated by stiffness with variable sensitivity. *Elife 6 (2017): e23190.*
8. Zeng, Y., Yi, J., Wan, Z., Liu, K., Song, P., Chau, A., Wang, F., Chang, Z., Han, W., Zheng, W., Chen, Y.-H., Xiong, C. and Liu, W. (2015), Substrate stiffness regulates B-cell activation, proliferation, class switch, and T-cell-independent antibody responses in vivo. *Eur. J. Immunol., 45: 1621-1634*
9. Wang, J.H., Li, B. Mechanics rules cell biology. *BMC Sports Sci Med Rehabil 2, 16 (2010).*
10. Swift J, Ivanovska IL, Buxboim A, Harada T, Dingal PC, et al. 2013. Nuclear lamin-A scales with tissue stiffness and enhances matrix-directed differentiation. *Science 341:1240104*
11. Engler AJ, Sen S, Sweeney HL, Discher DE. 2006. Matrix elasticity directs stem cell lineage specification. *Cell 126:677-89*
12. Dannhauser, D; Maremonti, M; Panzetta, V; Rossi, D; Netti, P.A; Causa, F. Mechanical phenotyping of breast cell lines by in-flow deformation-dependent dynamics under tuneable compressive forces.
13. Rossi, D., Dannhauser, D., Telesco, M., Netti, P.A., Causa, F. CD4+ Versus CD8+ T-lymphocyte identification in an integrated microfluidic chip using light scattering and machine learning (2019) *Lab on a Chip, 19 (22), pp. 3888-3898.* DOI: 10.1039/c9lc00695h
14. Dannhauser, D., Rossi, D., Ripaldi, M., Netti, P.A., Causa, F. Single-cell screening of multiple biophysical properties in leukemia diagnosis from peripheral blood by pure light scattering (2017) *Scientific Reports, 7 (1), art. no. 12666.* DOI: 10.1038/s41598-017-12990-4

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof. Domenico Caputo
Prof. Paolo Aprea

Supporting information:

Collaborazione con 3DnA Srl, società di ingegneria focalizzata sulle tecnologie di additive manufacturing che offre un servizio integrato di progettazione, ottimizzazione, simulazione, prototipazione e produzione con sistemi di stampa additiva industriali.

Periodo: 6 – 9 mesi.
Gruppo del prof. Mladen Eic, specializzato nello studio dinamico dei processi di diffusione, University of New Brunswick (Canada)

Periodo: 6 – 9 mesi.
Gruppo della prof.ssa Silvia Bordiga, con grande esperienza nel campo della modellazione molecolare dei fenomeni di adsorbimento/desorbimento, Università di Torino

SVILUPPO SOSTENIBILE DI MATERIALI NANOSTRUTTURATI PER LA CATTURA DI SPECIE INQUINANTI E/O PROCESSI DI ENERGY STORAGE

La crescente attenzione verso tematiche di carattere ambientale ha generato un notevole interesse verso materiali nanostrutturati, quali zeoliti e MOFs (Metal-Organic Frameworks), che vantano eccellenti capacità di rimozione e stoccaggio di greenhouse gas, quali la CO₂ [Am. Chem. Soc. 2005, 127, 51, 17998–17999] o di carburanti “green” per autotrazione, quali CH₄ e H₂ [IUCrJ 2017, 4, 131-135]. Ad oggi, il pieno sfruttamento di questi materiali è lungi dall’essere stato raggiunto, e la comunità scientifica propone di continuo nuove formulazioni con capacità di cattura/stoccaggio sempre più elevate [Energ. Fuel. 2017, 31, 5, 5376–5384]. Tuttavia, la rincorsa alla massimizzazione delle prestazioni rende la ricerca in questo campo piuttosto disordinata, ed i risultati e le soluzioni proposte appaiono spesso difficilmente generalizzabili e/o attuabili in contesti reali. Inoltre, gli approcci proposti, pur ispirati da ambiziosi obiettivi di sostenibilità, sono spesso essi stessi poco sostenibili dal punto di vista dei materiali impiegati e dei relativi processi di lavorazione. Il gruppo di ricerca proponente è da sempre molto sensibile sia al tema dei materiali porosi per disinquinamento o “energy storage” [J. Chem. Eng. Data 2010, 55(9), 3655–3661; Appl. Therm. Eng. 2016, 106, 1217-1224], sia alla tematica della sostenibilità ambientale dei materiali [Sci. Adv. Mater, 2014, 6(1), 164-170; J. Environ. Manage. 2011, 92(7) 1821-1827]. È in questa cornice che sarebbe inquadrata l’attività di ricerca, finalizzata al raggiungimento di una profonda comprensione dei principi generali dei fenomeni di adsorbimento/desorbimento di specifiche molecole mediante materiali nanoporosi. Considerata la molteplicità delle sfide che aspettano il dottorando, il candidato stesso potrà curare la ricerca nella direzione che preferisce nel rispetto dell’impianto complessivo del progetto, il cui sviluppo è descritto di seguito a grandi linee.

I ANNO

Studio approfondito della letteratura sull’adsorbimento/desorbimento di molecole in sistemi nanoporosi con l’obiettivo di individuare (i) l’ambito (o gli ambiti) con maggiori margini di miglioramento e (ii) i materiali più adatti allo scopo. Non si esclude la possibilità di combinare i materiali adsorbenti con matrici o agenti leganti per realizzare sistemi compositi monolitici. In questa fase della ricerca i materiali identificati saranno sintetizzati (se non acquisibili diversamente) e caratterizzati approfonditamente dal punto di vista morfologico e chimico/fisico per identificarne i limiti prestazionali e i campi di lavorabilità (temperatura, pH, stress meccanici, resistenza a solventi, ...). Infine, la scelta dei materiali dovrà tenere conto della loro sostenibilità, da valutare con l’ausilio di approcci ingegneristici quali l’analisi del ciclo di vita (LCA).

II ANNO

La conoscenza acquisita nel corso del I anno sarà messa a frutto nel corso del II anno, quando dovranno essere progettati campioni per

applicazioni mirate nel campo del disinquinamento o dell'energy storage. La prima parte del secondo anno dovrà essere rivolta allo studio approfondito della letteratura, anche brevettuale, per fissare i benchmark rispetto ai quali confrontare le prestazioni dei sistemi realizzati. La progettazione del materiale si potrà basare anche su uno studio di modellazione molecolare, considerato fondamentale in caso di sistemi compositi in cui le interazioni adsorbente-adsorbato potranno essere parzialmente schermate dalla presenza della matrice.

III ANNO

La conoscenza approfondita dei meccanismi chimico/fisici di adsorbimento/desorbimento, dei materiali e delle loro interazioni mutue sarà infine sfruttata per realizzare campioni prototipali finalizzati alla validazione delle ipotesi fatte in fase di progettazione. Le tecniche di realizzazione dei campioni saranno definite in funzione degli specifici materiali selezionati e delle relative finestre di lavorabilità. Tra le tecniche di formatura potrà essere investigata l'additive manufacturing, in virtù della possibile collaborazione con l'azienda 3DnA, fortemente interessata alla tematica del progetto.

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof. Ernesto Di Maio

Supporting information:

Partners involved in
the work:

Materias S.r.l

SIK – The Swedish

Institute for Food and

Biotechnology

Chalmers University of

Technology -

Structure and Material

Design

Several Universities
have food-engineering
programs. Among
those, the SIK and
Chalmers University of
Technology are
leading research
institution in the field
of foamed products
and are involved in
the project.

PHYSICAL FOAMING OF FOOD

Bread, pizza, cakes, and many other aerated food products are popular among consumers around the globe. Taste, texture, flavor, smell are the reasons why air is incorporated in such products [1]. Baked products, such as breads, are generally chemically foamed with yeast, that is considered a chemical blowing agent releasing carbon dioxide as a reaction product during the leavening process. Leavening is a rather slow process that may take few hours, bounding production logistic and productivity. As reported by Altman et al (1996), yeast intolerance is also a growing health problem [2]. Among the rich number of breadmaking technologies [3-8] proposed during the last 150 years, only a few of them are yeast-free. In this context, a foaming path alternative to the chemical one may be proposed and explored, making use of physical foaming. Such a dramatic transformation of the making process of course requires a deep understanding of the underlying physics and chemistry, that will be the focus of the three-years research work. For a robust design of the new technology, a careful work must be conducted including: i) blowing agent sorption in polymeric systems; ii) bubble nucleation and growth phenomena in viscoelastic natural polymers having complex molecular architecture; iii) analysis of thin liquid film stabilization by active biopolymers and iv) chemorheology of thermosetting viscoelastic polymers and the development of the molecular architectures during baking reactions.

[1] S. Deotale et al, Foaming Characteristics of Beverages and Its Relevance to Food Processing, Food Engineering Reviews, March 2020.

[2] D.R. Altman et al, Public perception of food allergy, Journal of Allergy and Clinical Immunology, June 1996.

[3] J. Dauglish, On a new system of bread manufacture, Journal of the society of Arts, April 1860.

[4] Y.H. Hui, Bakery products Science and Technology, Blackwell Publishing, 2006.

[5] P. Narender Raju, Bakery and Confection Technology, module 8, Seminar lesson, 2020.

[6] S. Cauvain, Technology of Breadmaking, Third Edition, Springer, 2015.

[7] Hicsasmaz et al, Leavened Dough Processing by Supercritical Fluid Extrusion, Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2003.

[8] G.S. Tucker, Radical Bread Process, British Baker, January 2011.

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof.ssa Enza Torino

Supporting information:

Collaborazioni con

- Erasmus University Medical Center (Erasmus MC) based in Rotterdam, Netherlands
- Istituto di Cura Rizzoli - Istituto di Ricovero e Cura a Carattere Scientifico (IRCCS) con sede a Bologna
- KTH – Royal Institute of Health - Department of Biomedical Engineering

Possibilità di

Esperienza all'estero presso Erasmus University Medical Center (Erasmus MC) based in Rotterdam, Netherlands and KTH – Royal Institute of Health - 3- 6 mesi

ENGINEERING PRECISION NANOPARTICLES FOR DRUG DELIVERY

Recentemente la progettazione di nanoparticelle hanno visto progressi nelle strategie di sintesi rivolti all'ottenimento di architetture complesse, frazioni bio-reattive e agenti mirati per migliorare il trasporto di sostanze attive, rispondendo alle esigenze della medicina di precisione e personalizzata.

L'obiettivo della medicina di precisione è utilizzare le informazioni del paziente - come il profilo genetico, le esposizioni ambientali o le comorbidità - per sviluppare un piano di trattamento individualizzato. L'uso della precisione riduce al minimo l'impatto dell'eterogeneità del paziente e consente una stratificazione più accurata del paziente, una migliore specificità del farmaco e un dosaggio ottimizzato o strategie combinatorie. Tuttavia, le terapie di precisione sono soggette alle stesse barriere biologiche alla somministrazione di altri farmaci, il che limita il loro potenziale clinico. Pertanto, la ingegnerizzazione di nanoparticelle, ottenute partendo da dati dei pazienti e progettati per superare particolari barriere in una popolazione di pazienti stratificata, potrebbero migliorare notevolmente l'erogazione e la risposta alle terapie di medicina di precisione.

Questo progetto di dottorato mira a studiare le interazione tra cellule e materiali per progettare sistemi complessi - comprese vescicole naturali e sintetiche in terapie combinate mediate da nanovettori - per alterare pathway molecolari e cellulari, massimizzare l'efficacia terapeutica e diagnostica di macromolecole specifiche, mirare a particolari fasi del ciclo cellulare o superare meccanismi di resistenza ai farmaci.

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof. Maurizio Ventre

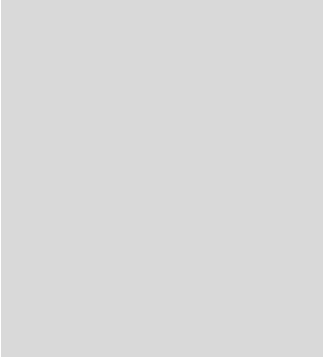
Supporting information:

Collaborazioni con Prof. Alessandra Cambi, Cell Biology Department of the Radboud University Medical Center in Nijmegen in The Netherlands

Periodo di circa sei mesi presso il Cell Biology Department of the Radboud University per acquisire competenze sulla manipolazione e caratterizzazione di cellule del sistema immunitario.

BIOMATERIALI

Le caratteristiche biofisiche del microambiente cellulare (con particolare riferimento alla microstruttura e alla meccanica) sono noti regolatori di diversi aspetti delle funzioni e fato cellulari di diversi tipi di cellule, ivi incluse le embrionali, staminali e alcuni tipi di cellule connettivali. Molto poco è noto sul ruolo dei segnali biofisici sulle cellule del sistema immunitario. Eppure, queste cellule maggiormente intervengono in microambienti che mostrano significativi cambiamenti delle caratteristiche biofisiche, ad esempio durante un processo fibrotico, infiammatorio o nella progressione tumorale ove si assiste a numerosi cambiamenti della composizione e assemblaggio della matrice extracellulare e della sua rigidità. Una recente letteratura ha dimostrato come microambienti di coltura artificiali, che presentano specifiche caratteristiche di rigidità o di disposizione spaziale di ligandi sono in grado di controllare la polarizzazione proinfiammatoria/pro rigenerativa di macrofagi. Similmente le cellule dendritiche, ovvero le più performanti tra le antigen presenting cells, cambiano radicalmente fenotipo in accordo alle caratteristiche biofisiche del microambiente di coltura. Tali lavori, sebbene aprano nuovi orizzonti della meccanobiologia, non chiariscono i meccanismi di riconoscimento e risposta delle cellule del sistema immunitario a stimoli biofisici e non definiscono in maniera chiara configurazioni di segnali ottimali per ottenere un efficace controllo sul comportamento cellulare. Informazioni di questo tipo sarebbero utili per la definizione di nuove terapie basate sulla manipolazione della matrice extracellulare per modulare la risposta del sistema immunitario, oppure per l'ingegnerizzazione di scaffold o dispositivi per sviluppare vaccini basati su antigen presenting cells. Questa proposta progettuale mira ad investigare, in maniera sistematica, il ruolo di classi di segnali biofisici sul comportamento di cellule del sistema immunitario, con particolare riferimento a macrofagi e/o cellule dendritiche. In particolare, si vogliono realizzare librerie di segnali "materiali" ovvero segnali (quali topografia, rigidità, pattern di ligandi) incorporati in substrati sintetici ed analizzare la risposta di cellule del sistema immunitario in termini di morfologia, profilo molecolare e funzionale, mettendo in campo saggi ad hoc (ad esempio priming di linfociti o condizionamento di altre cellule mediante la produzione endogena di citochine). La prima fase dell'attività sarà focalizzata sullo studio di segnali "singoli" (ovvero solo topografia, solo meccanica, ...). In particolare, materiali sintetici quali hydrogel o elastomeri saranno sintetizzati e funzionalizzati al fine di presentare specifici segnali biofisici (ad es. pattern topografici nel range nanometrico-micrometrico; rigidità nel range Pa – kPa; diversi livelli di bioadesività) che siano quindi rappresentativi di stati fisiologici o patologici della matrice extracellulare. Successivamente segnali di diversa natura saranno combinati in singole piattaforme per valutare



l'effetto sinergico di diversi segnali sul comportamento cellulare. Lo scopo di queste attività è quello di definire set ottimali di segnali biofisici per controllare il comportamento di cellule del sistema immunitario. Lo/a studente/ssa acquisirà competenze sulla funzionalizzazione e caratterizzazione di substrati per colture cellulari (replica molding, photopatterning, AFM, SEM), sulle colture cellulari e loro caratterizzazione in senso morfologico e molecolare (microscopia confocale, immunofluorescenza, rt-PCR).

Ingegneria dei Materiali e delle Strutture

Advisor:

Prof. Maurizio Ventre
Dott. ssa Maria Grazia
Raucci - Istituto per i
Polimeri, Compositi e
Biomateriali (IPCB-
CNR)

Supporting information:

L'attività di ricerca
sarà finanziata dal
Progetto PRIN ACTION
- 2017SZ5WZB – dal
titolo “Advanced
injectable nano-
composite
biomaterials with dual
therapeutic/regenerat
ive behaviors for bone
cancer” e sarà svolta
presso l'Istituto per i
Polimeri, Compositi e
Biomateriali (IPCB-
CNR)

MODELING AND SIMULATION OF EXTRUDATE SWELL OF COMPLEX MATERIALS

Lo scopo dell'attività di ricerca riguarda la progettazione e lo sviluppo di biomateriali per il trattamento del tumore osseo e per il processo rigenerativo. In particolare, saranno sviluppati:

- Materiale iniettabile, a base di PluronicF127/biovetri/fosforo nero esfoliato (oppure ossido di graphene) per la chirurgia mini-invasiva;
- Scaffold 3D, facendo uso di Gehlenite ink e successivo coating con PluronicF127/biovetri/fosforo nero esfoliato.

Gehlenite ink è compost da calico, alluminio e silice ($\text{Ca}_2\text{Al}_2\text{SiO}_7$). È stato riportato che Gehlenite presenta proprietà meccaniche migliori rispetto ai bioceramici commerciali (es. Beta-TCP, silicate di calico, idrossiapatite, ecc).

I materiali saranno caratterizzati dal punto di vista chimico-fisico, meccanico e biologico. In particolare, sarà validate in vitro l'efficacia dei materiali nell'inibire selettivamente la proliferazione di cellule tumorali e dalla capacità di supportare e/o indurre la formazione di nuovo tessuto sano.

**Ingegneria
Chimica &
Ingegneria dei
Materiali e delle
Strutture**

Advisor:

Prof. Francesco Greco,
Dr. Raffale Pastore

**Supporting
information:**

Collaborazioni:

- Prof. Walter Kob,
Università di
Montpellier (Francia)
- Prof. Steve Granick,
IBS, Seoul (Korea)
- Prof. Simone
Napolitano, Université
libre de Bruxelles
(Belgio)
- Dr. Jack Douglas,
NIST, Gaithersburg
(USA)
- Procter & Gamble,
Cincinnati (USA)
- Procter & Gamble,
Brussels (Belgio)

ANOMALIE NELLA DINAMICA DI SISTEMI POLIMERICI

La dinamica di sistemi polimerici, in un vasto range di concentrazione e temperatura, è ben descritta da modelli teorici basati sul moto Browniano e sviluppati a partire dai contributi di de Gennes, Doi e Edwards. Tuttavia, tali modelli possono fallire in particolari condizioni (i.e. temperature prossime alla transizione vetrosa, alto confinamento, interazioni con superfici eterogenee), che sono altresì di grande rilevanza per una varietà di applicazioni (i.e. nanocompositi, “filled rubbers”, lubrificazione). Effetti inattesi e non ancora compresi che possono emergere in tali condizioni includono:

- Diffusione Fickiana non Gaussiana
- Rottura della relazione di Stokes-Einstein tra diffusività e viscosità
- Aumento della temperatura di transizione vetrosa con il confinamento

L’obiettivo di questo progetto è lo studio della dinamica e in particolar modo della diffusione in sistemi polimerici in tali condizioni “non-standard”.

L’attività si baserà su simulazioni numeriche, ispirate a modelli recentemente sviluppati nell’ambito del nostro gruppo [Pastore et al., PCCP 2019]

Il progetto potrà anche comprendere attività sperimentale realizzata nell’ambito di una collaborazione già attiva [Pastore et al., PRL 2021] tra il nostro gruppo e il gruppo di Spettroscopia Laser e Manipolazione Ottica del nostro Ateneo, diretto dal prof. Antonio Sasso.

Inoltre, una parte fondamentale del progetto consisterà nella modellizzazione e interpretazione teorica dei risultati derivanti dalle simulazioni e dagli esperimenti.

Si propone di seguito un programma orientativo delle attività, distribuito su 36 mesi.

- mesi 1-6: ricerca bibliografica
- mesi 6-24: sviluppo e analisi delle simulazioni numeriche
- mesi 18-24: coinvolgimento in attività sperimentali
- mesi 24-36: modellizzazione e interpretazione teorica

**Ingegneria
Chimica &
Ingegneria dei
Materiali e delle
Strutture**

Advisor:

Prof. Mariano
Sirignano
Prof. Martina Salzano
de Luna

**Supporting
information:**

Collaborations:

- CNR- STMS
- CNR – IPCB
- Prof Gustav
Nyström, ETH
(Zurich)

**NEW USE OF COMBUSTION BY-PRODUCTS FOR SYNTHESIS
OF NANOSTRUCTURED MATERIALS FOR GASEOUS AND
PARTICLE POLLUTANT REMOVAL**


Indoor pollution is a major concern due to the current lifestyle of urban residents who spend up to 90% of their time indoors [Spengler & Sexton, 1983; Klepeis et al., 2001]. Controlling the quality of indoor air is hence crucial not only to preserve human health, but also to improve life quality and comfort. Among the most important pollutants, including organic volatile compounds and NO_x, recent studies also individuated CO₂ as a critical indoor pollutant since at relatively high concentrations (> 1000 ppm) it has been found to degrade physical or even cognitive performances [Satish et al., 2012; Allen et al., 2016]. Accordingly, an effective sorbent should exhibit the following key properties:

- high removal ability towards various gaseous pollutants at practically relevant concentration values, to address indoor pollution with respect to different pollutants;
- fast adsorption, to be effectively used in air-circulating systems;
- reversible adsorption capacity, to break down costs.

The overall goal of the present 3-years research proposal fits in this frame, as it aims at the development and validation in real working conditions of composite filters for simultaneous removal of multi-pollutants by adsorption. More specifically, the idea is producing hierarchically porous composite filters by embedding mesoporous carbon particles in a macroporous polymeric framework.

The choice of using mesoporous carbon particles, i.e. soot particles, as sorbent material to be embedded in a polymeric matrix fits into the possibility to use a relative low-cost material currently adopted as a key intermediate product in the rubber industry but substantially used as filler, especially for tires.

In the first part, the project aims at the selection and synthesis of the starting materials to produce composite adsorbents. The mesoporous carbon particles will be produced and optimized in their key features (, i.e. mesoporosity, particle size, fractal dimension, etc.) by means of a flame synthesis approach in order to have a continuous and scalable reactor for massive production. In order to achieve particle production with desired features the combustion reactor is an ideal candidate, due to the large number of tunable parameters, its intrinsic autothermic and continuous flow characteristic and its proven scalability. Once collected the mesoporous carbon particles will be dispersed in an aqueous solution with the help of biopolymers. Then, the research efforts will be mainly directed towards the manufacturing of model aerogels in order to assess their overall adsorption performances and to tune the most suitable formulation to produce the composite material by 3D printing coupled with freeze-drying. Finally, once the applicability and feasibility of the most promising aerogels have been assessed, the development



and validation of a proof-of-concept device will take place. The devices obtained will be tested in real working conditions of composite filters for simultaneous removal of multi-pollutants by adsorption. The project will contribute to the advancement of knowledge in the field of carbon particle dispersion and carbon-based aerogel design and production and it will produce a first prototype of working carbon-based sorbent which will open the route for a larger use of this simple and effective device.

**Ingegneria
Chimica &
Tecnologie e
Sistemi di
produzione**

Advisor:

Prof. Pier Luca
Maffettone
Prof. Antonino
Squillace
Prof. Daniele
Tammaro

**Supporting
information:**

Alcune delle attività potranno essere condotte presso 3DnA s.r.l., azienda che ha anche un laboratorio congiunto presso il CeSMA e l'impianto semi-industriale di Sulzer Chemtech, azienda leader nella produzione di impianti industriali per la schiumatura e che, recentemente, ha pubblicato dei brevetti sulla schiumatura mediante processi additivi [3].

[3] Pat. EP3616876A1, "3d printing system for preparing a three-dimensional object".

STUDIO, SVILUPPO E CARATTERIZZAZIONE DI PROCESSI DI PRODUZIONE ADDITIVA AVANZATA DI MANUFATTI A GEOMETRIA COMPLESSA REALIZZATI IN SCHIUME POLIMERICHE RINFORZATE CON FIBRE

Le schiume polimeriche trovano applicazione in svariati campi in virtù della loro bassissima densità, discrete proprietà meccaniche e capacità isolanti acustiche e termiche [1]. Al contempo i più avanzati processi manifatturieri additivi consentono la realizzazione di manufatti a geometria complessa con una sempre maggiore varietà di materiali, in particolare polimerici e compositi a matrice polimerica, sia fibra corta sia soprattutto a fibra lunga continua. Ad oggi esistono varie pubblicazioni scientifiche che testimoniano la possibilità di produrre schiume polimeriche mediante processi additivi [2], ma rarissimi sono i casi di schiume rinforzate con fibre, sia lunghe sia corte. La presente proposta intende studiare e proporre nuove modalità di fabbricazione di manufatti in schiuma polimerica a geometria complessa da realizzare con processi additivi. Ci si propone inoltre di governare il processo di schiumatura contestualmente al processo di fabbricazione e governare in particolare la morfologia delle celle in funzione dei parametri di processo al fine di realizzare manufatti tailored con il desiderato gradiente di densità e caratteristiche microstrutturali e meccaniche.

Articolazione in fasi temporali della proposta:

studio dei principali processi di fabbricazione additiva per polimeri e selezione dei materiali idonei alla fabbricazione di schiume;
selezione dei processi di fabbricazione additiva che possano consentire la gestione della doppia fase, polimero e fibra (sia corta sia continua);
modellazione del processo di fabbricazione e schiumatura;
progettazione del processo di solubilizzazione di gas, estrusione e schiumatura per l'ottenimento di specifiche morfologie cellulari (i.e. dimensione, densità ed orientazione delle bolle nei microfilamenti schiumati);
realizzazione di manufatti e loro caratterizzazione sperimentale (microstrutturale e meccanica);
Analisi costi-benefici-sostenibilità delle soluzioni tecnologiche proposte e confronto con processi tradizionali.

[1] Binks, Bernard P., and Ryo Murakami. "Phase inversion of particle-stabilized materials from foams to dry water." *Nature materials* 5.11 (2006): 865-869.

[2] Jiang, J., Oguzlu, H., & Jiang, F. (2021). 3D printing of lightweight, super-strong yet flexible all-cellulose structure. *Chemical Engineering Journal*, 405, 126668.

Advisor:

Prof.ssa Almerinda Di
Benedetto

NOVEL PROCESS FOR GREEN H₂ PRODUCTION

Climate neutral economy is globally recognized as one of the main challenges for a sustainable future. Scholars in both industry and academia agree in foreseeing a radical shift in sustainability and climate policy in the next future. The increasing importance is testified by the amount of resources currently allocated for a sustainable paradigm shift. The chemical industry has a key role in the development of a circular sustainable economy, integrating the needs of the society and environment. Nevertheless, on a global scale, the use of renewable materials and energy is still problematic, with oil, natural gas, and coal still covering most of the world energy consumption. According to the European Union directives and the Paris Agreement, hydrogen and gas infrastructure will play a fundamental role in the transition to a climate neutral economy by 2050. Hydrogen is one of the main building blocks of the bulk and fine chemical industry and a promising energy carrier. The main advantages of hydrogen as an energy carrier are related to its high calorific value and the absence of carbonaceous gases deriving from its combustion. However, most hydrogen is currently produced from fossil fuels, via hydrocarbon reforming or pyrolysis processes. Processes from renewable sources include biological and thermochemical treatment of biomass and water splitting. Both hydrogen production from fossil fuels and thermochemical processes of biomass requires high temperature.

Aim of the project: In this research project, we aim to investigate and optimize a new process for hydrogen production under mild conditions, based on multi-step catalytic redox cycles starting from sodium metaborate (NaBO₂) and bio-derived chemicals. Sodium metaborate NaBO₂ is a readily available and relatively cheap oxide with a wide range of industrial applications. It is also a by-product of the hydrolysis reaction of sodium borohydride: $\text{NaBH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NaBO}_2 + 4\text{H}_2$. In aqueous solution, NaBH₄ is capable of undergoing a catalyzed hydrolysis reaction, releasing 90% of the stoichiometric hydrogen and producing sodium metaborate NaBO₂. The bottleneck for the wide adoption of NaBH₄ for hydrogen storage is represented by the difficult regeneration of NaBH₄ from NaBO₂, consisting to date of a multi-step process which is inefficient, costly and with high environmental impact. The experimental project aims to investigate a novel process for the regeneration of NaBH₄ under mild conditions.

Approach: A multi-disciplinary approach combining the expertise of chemists and chemical engineers, with a shift towards the recent applications of machine learning techniques to the development of chemical processes will be implemented. The study will be carried out through numerical simulations, opportunely modifying an open source CFD-DEM code, able to handle both the fluid dynamics (CFD) and the particle dynamics (DEM).

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Pier Luca
Maffettone
Prof. Gaetano D'Avino
Prof. Marco Trofa

**Supporting
information:**

A period (from 6 to 9 months) at a European University or research center specialized in computational rheology is planned. Possible host institutions are: University of Minho (Portugal), Technische Universiteit Eindhoven (Netherlands).

FLUID DYNAMICS OF PARTICLE VISCOELASTIC SUSPENSIONS THROUGH CFD-DEM METHODS

The flow of particle-laden complex fluids represents a common problem in many fields of industry and biology. Some examples include the processing of highly filled viscoelastic polymer melts and elastomers [Liff et al., Nat. Mater. 6 (2007); Fallon et al., Addit. Manuf. 30 (2019)], processing of semi-solid conductive flow battery slurries [Olsen et al., Soft Matter 12 (2016)], cementing and hydraulic fracturing operations using solids-filled muds and slurries [Barbati et al., Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. 7 (2016)], as well as the flow-induced migration of circulating cancer cells in blood [Lim et al., Nat. Commun. 5 (2014)]. While the presence of dispersed particles already determines a non-Newtonian behavior, a viscoelastic suspending fluid (e.g., a polymer solution or polymer melt) further complicates the scenario.

In many large-scale industrial applications, such as hydraulic fracturing and well drilling [Shao et al., Eng. Appl. Comput. Fluid Mech. 13 (2019)], it is the bulk or ensemble-averaged behavior of the mixture that is mostly required, for which upscaled three-dimensional numerical models, based on the Eulerian-Lagrangian multiphase formulations, have been employed and shown to be promising candidates for fast predictive simulations.

Among these formulations, a well-established framework is represented by CFD-DEM. However, due to the lack of closure equations for drag, lift, and hindrance (i.e., the effect of neighboring particles and walls) in complex fluids, it has been limited to Newtonian suspensions. The extension to viscoelastic suspensions has only very recently started [Faroughi et al., J. Non-Newton. Fluid Mech. 277 (2020)].

Objective

Implementation of a CFD-DEM code for the unresolved simulation of particle viscoelastic suspensions. Application of the developed code for the design and optimization of processes of industrial interest, such as filled polymer extrusion, and for the study and prevention of fouling phenomena.

Method

The study will be carried out through numerical simulations, opportunely modifying an open source CFD-DEM code, able to handle both the fluid dynamics (CFD) and the particle dynamics (DEM).

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Salvatore
Costanzo

Supporting information:

Possibili

collaborazioni:

- Prof. P. Fischer
all'ETH di Zurigo,
- Prof. Michel
Cloitre all'ESPCI di
Parigi
- Prof. Daniele
Parisi, Università
di Groninga
- Prof. Dimitris
Vlassopoulos
- Dr. Laurence
Ramos
all'Université de
Montpellier.

Almeno 6 mesi presso
i laboratori di alcuni
dei partner
internazionali per
apprendere tecniche
di misure reo-ottiche
e relativo trattamento
dei dati per lo studio
della transizione sol-
gel di sistemi
fotosensibili

IDROGELI PER BIO-STAMPA TRIDIMENSIONALE

La bio-stampa è un processo di fabbricazione di tessuti organici viventi tridimensionali a partire da biomateriali contenenti colture cellulari. I tessuti così ottenuti possono essere utilizzati in un'ampia gamma di applicazioni biomedicali, ad esempio per trapianti oppure per testare nuovi farmaci. Sebbene le potenzialità della bio-stampa siano ancora oggetto di studio, tale tecnica si è già dimostrata efficace per ricreare in laboratorio tessuti umani come pelle, cartilagine ed ossa.

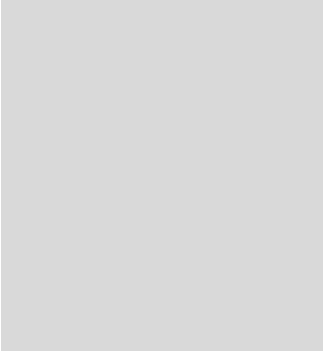
Nell'ambito della biostampa, una delle strategie più promettenti per la fabbricazione dei bio-tessuti è quella basata sull'estrusione di idrogeli caricati con cellule. Tale approccio consiste nella deposizione di un filamento di bio-inchiostro strato per strato, a formare un costrutto 3D sul quale proliferano le cellule contenute nell'inchiostro stesso. Al momento della deposizione, il filamento deve essere allo stato liquido (comunemente chiamato sol), per poi gelificare in modo tale da formare la struttura tridimensionale. Per far sì che il costrutto biologico si sviluppi al meglio ed abbia determinate caratteristiche meccaniche, è necessario che la matrice all'interno della quale sono contenute le cellule si trasformi da liquido a gel in risposta a stimoli opportuni, e che il gel risultante abbia delle specifiche proprietà viscoelastiche. Ad esempio, la gelificazione del bio-inchiostro può essere indotta attraverso variazione di temperatura, reazione con un agente reticolante, oppure radiazione ultravioletta. Il gel risultante deve, da un lato, garantire un ambiente ottimale per la proliferazione cellulare, in termini di temperatura, umidità e permeabilità ai nutrienti. Dall'altro, esso deve avere una certa stabilità meccanica per evitare che il costrutto collassi durante la crescita cellulare.

Le matrici utilizzate per la fabbricazione di bio-inchiostri sono oggetto di interesse crescente da parte della comunità scientifica. Gli idrogeli più utilizzati sono la gelatina animale, il collagene, il chitosano, l'acido ialuronico, i derivati cellulosici, e l'alginato. Tuttavia, nessuno dei materiali elencati è in grado di formare gel ottimali per la fabbricazione di bio-tessuti. In realtà, la letteratura relativa alla bio-stampa è carente di studi sistematici che mettano in relazione la viscoelasticità dei bioinchiostri durante la transizione sol-gel e la performance di stampa degli stessi.

Lo scopo di questo progetto è quello di studiare le proprietà viscoelastiche relative alla transizione sol-gel di idrogeli per bio-stampa con un duplice obiettivo:

1. Ottimizzare il processo di transizione sol-gel attraverso la formulazione di nuovi idrogeli che gelifichino sotto opportune condizioni
2. Correlare le proprietà viscoelastiche del gel risultante con le performance di stampa.

Per realizzare gli obiettivi sopra descritti, il candidato lavorerà secondo un approccio multidisciplinare. In una prima fase, egli si occuperà di



studiare la reologia della transizione sol-gel di materiali esistenti e valutare la possibilità di formulare miscele di biopolimeri per ottimizzare il processo di transizione. Simultaneamente, il candidato si concentrerà sulla modifica o sulla costruzione di una bio-stampante che permetta di controllare in maniera dettagliata il processo di gelificazione durante la stampa e correlarlo con la storia di flusso durante le misure reometriche. Nella fase finale, il candidato si focalizzerà sulla possibilità di caricare gli idrogeli con cellule in modo da realizzare costrutti organici in laboratorio.

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Francesco Di
Natale

Supporting information:

The Ph.D. project will be included in the ongoing research cooperation with the following Italian and European academic institutions:

- Università della Campania Luigi Vanvitelli – Dipartimento di Ingegneria; Dipartimento di Matematica e Fisica;
- NHL Stenden University of Applied Science - Leuwarden (NL)
- Universidad de Málaga - Malaga (ES)

The Ph.D. candidate will spend part of the Ph.D. programs at the NHL Stenden University of Applied Science to cooperate with prof. L.L.F. Agostinho (3 months within the first year of Ph.D. program) and at the Universidad de Málaga to cooperate with the group of Prof. I.G. Loscertales (3 months)

APPLICATION OF CHEMI-ELECTRO-HYDRODYNAMIC ATOMIZATION (CEHDA) TO CHEMICAL PROCESS DESIGN

Electro-hydrodynamic atomization (EHDA) is an emerging tool to produce at very low energy costs, sprays of highly reactive liquid droplets that present higher surface areas, improved heat and mass transfer rates and specific reactive environments.

Recent findings indicate that EHDA can be proficiently used to develop chemical processes thanks to the peculiar interactions between the dispersed (droplets) and the continuous (either liquid or gas) surrounding phase. Successful applications of EHDA to chemical processes includes absorption and stripping, desalination, humidification, liquid-liquid extraction as well as particle capture processes. During these processes, transport of active chemical species and subsequent reactions take place both at the droplets' interfaces and in the droplets bulk phase. These chemical interactions play a role in the same electromagnetic and hydrodynamic phenomena that drive the EHDA process. Indeed, the term chemi-electrohydrodynamics atomization (CEHDA) can better describe the evolution of EHDA based chemical processes. There are a few studies available on CEHDA in the pertinent literature and the assessment of experimental methodologies to study this process and of the definition of a model framework for the interpretation of the experiments are still missing.

In particular, the project objectives are:

1. Characterization of electrosprayed droplets by means of high-speed image processes and of spray electric current/droplets charge;
2. Development of gas absorption/desorption lab scale tests to assess gas-liquid mass transfer phenomena in electrified jets and charged droplets (application to absorber/stripper design)
3. Development of lab scale solvent extraction tests in coaxial electrosprays for liquid-liquid mass transfer phenomena in electrified jets and charged droplets (application to solvent extractor design)
4. Development of a first physical-chemical process for CEHDA phenomena.
5. Assessment of model equations and guidelines for the design of relevant CEHDA based chemical processes (absorption/stripping; solvent extraction; humidification)

For its role in chemical processes, water will be selected as key fluid for this study.

The project methodology will include experimental and modelling analyses. In particular, CEHDA will be investigated through a number of experimental techniques already available in the DICMAPÍ's laboratories for which high-quality experimental protocols will be developed to achieve:

1. High speed analysis and image processing for characterization of droplets morphology.

within the second year of the Ph.D. program).

2. High resolution analysis of spray current and droplets charge density.
3. Characterization of surface tensions for charged droplets.
4. Characterization of bouncing and splashing phenomena for charged droplets.
5. Chemical-physical characterization and analytical determination of target solutes in liquid and gas phases during the mass transfer experiments.

Modelling analysis will be based on:

1. A thorough study of the pertinent literature pertaining to the thermodynamic of water-gas and water-liquid interfaces and to conventional EHDA processes.
2. Application of traditional methods of chemical engineering for the assessment of mass transfer rates in gas-liquid and liquid-liquid systems and for the design of the selected chemical processes (absorption/stripping; solvent extraction; humidification)
3. Application of big data analytics and machine learning techniques for data interpretation

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Domenico
Caputo

Supporting information:

Collaborazione in
corso con CNR-STEMS
(Istituto di Scienza e
Tecnologia per
l'Energia e la Mobilità
Sostenibili) con
possibilità di
finanziamento di
borsa di studio
triennale.

E' previsto un periodo
all'estero di ca. 6 mesi
tra il secondo e terzo
anno del dottorato
sulla base delle
collaborazioni
internazionali
attivate/in fase di
definizione per lo
svolgimento di attività
di ricerca
sperimentale,
possibilmente
usufruendo anche del
contributo alla
mobilità di programmi
specifici
(ShortTermMobility)
del CNR.

EFFICIENT CO2 CAPTURE AND METHANATION

A strong reduction of source greenhouse gas emissions from industry and energy sectors (decarbonization) is crucial to reaching the ambitious goal of carbon-neutrality set by the European Green Deal.

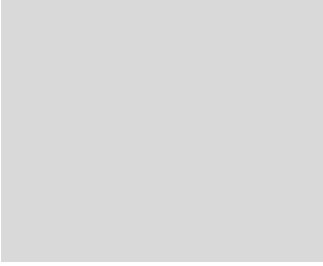
An innovative solution is represented by the combined capture and hydrogenation of CO₂. The idea is to trap CO₂ from a CO₂-containing stream using a dual functioning material (DFM) composed of a highly dispersed supported adsorbent which provides at the same time the CO₂ storage function and methanation active element to produce CH₄ upon reaction with renewable H₂. This process is operated cyclically by alternating phases where the DFM is exposed to the flue gas and CO₂ is selectively adsorbed, and phases where H₂ is fed and the stored CO₂ is hydrogenated to methane. Notably, by eliminating a thermal swing process, the conversion of CO₂ to SNG using DFMs constrains the energy input to only renewable sources (in the form of H₂), thus allowing the CO₂ capture and utilization processes to approach carbon neutrality.

General scope of the research:

Develop highly innovative dual function catalytic material systems to facilitate the production of methane or other synthetic fuels from industrial flue gas emissions aiming at a significant increase in the overall efficiency compared to the State-of-the-Art

To capture CO₂ directly from exhaust gases, the DFM needs to be stable in presence of reactive combustion effluents, primarily steam and unreacted O₂, which will oxidize the methanation catalytic metal. Then, when the same material is exposed to a H₂-rich environment, the catalyst must be easily reduced to its active state for the methanation of the adsorbed CO₂ to occur.

In particular, we plan to experimentally investigate the key features capable to boost the overall performance of DFMs based on Ru supported on mixed alkali-aluminate phases (such as hydrotalcites) or alkali exchanged zeolites with tailored CO₂ capture features. In particular, nanoscale engineering of the active phase will be achieved through the control of the dimensions of Ru crystallites, their mutual with the sorbent phase as well as throughout the spherical particles (homogeneous vs. egg-shell vs. egg-yolk). In the end, what is pursued is the activation of an internal CO₂ spill-over mechanism from storage sites to adjacent Ru catalytic sites where the CO₂ can be effectively hydrogenated (without an intermediate thermal desorption phase) DFMs will be synthesized and fully characterized ex-situ and in-situ using a wide variety of techniques and particularly SEM-EDX, XRD, BET, H₂ chemisorption, PSD, FT-IR, CO₂-TPD, H₂-TPRx, TGA/DSC-MS, DRIFT and Raman spectroscopy to investigate mechanistic aspects unveiling pathways involved in cyclic CO₂ capture and methanation. Catalytic tests will be performed at atmospheric pressure under continuous flow conditions in a fixed bed reactor specifically designed to perform cyclic



experiments of CO₂ capture and subsequent methanation with alternate feeds including the presence of steam, O₂ and possibly NO_x. Those experiments will aim at evaluating the effect of the operating parameters (T, Gas Hourly Space Velocity, feed composition) on the reaction kinetics and CH₄ yield, as well as the long-term stability of the DFMs upon repeated cycles

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Andrea D'Anna

**Supporting
information:**

In cooperation with Eni in the framework of the project "Valutazione della formazione del particolato secondario in aria confrontando carburanti e combustibili diversi".

Activities will be performed partially at Eni – San Donato Milanese, at the University of Eastern Finland in Kuopio and at the University of Patras, Greece.

DETERMINATION OF THE ENHANCEMENT FACTOR AND OF THE SIZE DISTRIBUTION FOR SECONDARY PM FORMED DURING ATMOSPHERIC AGING OF GASOLINE AND DIESEL VEHICLE EXHAUSTS

Recent studies indicate that secondary particulate matter (PM) originating from vehicular exhaust can be significantly larger than primary PM. The effect of fuel characteristics and engine operating conditions on the formation of secondary aerosol is still not sufficiently investigated and understood. New fuel formulations may have unpredictable impacts on secondary PM formation. The objectives of this research activity is to develop a procedure to assess characteristics of emissions from gasoline and diesel vehicles and for testing the propensity of different gasoline fuels to generate secondary aerosols. Further, the project aimed to characterize the chemical and physical properties of primary and secondary organic aerosols from gasoline and diesel vehicles.

We have recently acquired, in the framework of the ACTRIS-IT project, an Aerosol Mass Spectrometer with a soot probe (SP-Hr-TOF-MS) and have already available particle size measurement facilities (SMPS and DMA with resolution down to 1 nm and Electrical Low Pressure Impactors). A Photochemical Emission Aging Reactor is under construction and it is hosted in the "near-surface aerosol" lab at Napoli San Giovanni university site. The SP-Hr-TOF-MS and the aging reactor will be used to develop, in cooperation with Eni, a measure protocol, based on a smog chamber experiment, to simulate secondary aerosol (SA) mass formation potential in order to correlate fuel composition with SA formation.

A atmospheric oxidation modeling will be developed to complement the experimental activities.

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Fabio Murena

**Supporting
information:**

- Centro Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Madrid Spagna;
- University of Birmingham, School of Geography, Earth and Environmental Sciences;
- ENEA Portici;
- ORION srl.

SI prevede la possibilità di due periodi all'estero:

- o presso il Prof. Martilli del Centro Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Madrid Spagna
- o presso il Prof. Rob Mackenzie della Università di Birmingham, School of Geography, Earth and Environmental Sciences

Il periodo previsto è di 6 mesi.

**INQUINAMENTO ATMOSFERICO E SVILUPPO SOSTENIBILE
DEL CENTRO STORICO DI NAPOLI**

Lo sviluppo sostenibile dei centri storici è tra le principali problematiche per lo sviluppo di molte aree urbane in Italia e in Europa. Il centro storico di Napoli occupa circa il 14.5% dell'intera area urbana ed è il più esteso di Europa. Dal 1995 è stato inserito dall'UNESCO tra i siti patrimonio dell'umanità. Lo sviluppo sostenibile delle aree urbane deve bilanciare considerazioni ambientali con politiche di sviluppo economico, garantire la equità sociale e salvaguardare gli interessi delle generazioni future. Tra le tematiche ambientali di particolare criticità per lo sviluppo sostenibile del centro storico di Napoli c'è quella dell'inquinamento atmosferico. Le strade del centro storico di Napoli sono per la maggior parte street canyon profondi caratterizzati da rapporto altezza degli edifici/larghezza della strada maggiore di 2 che determina una scarsa ventilazione e quindi un accumulo degli inquinanti. Campagne di monitoraggio di monossido di carbonio, benzene, particolato fine (20 – 1000 nm), ossidi di azoto ed ozono svolte in passato, hanno indicato una forte criticità ambientale, in considerazione anche della elevata densità abitativa.

Infatti, si sono osservati livelli di concentrazione maggiori rispetto a quelli registrati dalle stazioni di traffico nell'area urbana di un fattore da 1.7 a 2.6 per il CO; da 1.9 a 4.0 per le particelle fini e pari a circa 2 per gli NOx. Non risultano studi sugli effetti sulla salute che tali livelli di inquinamento possano determinare sulla popolazione residente in questa area.

L'attività che si propone prevede:

1. una diffusa campagna di monitoraggio all'interno del centro storico su diversi inquinanti: particolato fine e ultrafine, NOx, O3, COV e metalli pesanti attraverso l'utilizzo di sensori portatili di diverse tecnologie;
2. una valutazione dell'impatto delle emissioni veicolari e delle emissioni portuali sull'area del centro storico di Napoli. A questo scopo si utilizzeranno modelli a scala locale sviluppati per gli street canyon e modelli CFD per la dispersione su scala urbana. Il modello da svilupparsi a scala locale sarà un modello a box con la implementazione di un modulo che tenga conto dei principali processi cinetici relativi alle reazioni tra ossidi di azoto e ozono. Il modello CFD, invece, dovrà riuscire a rendere compatibile la elevata precisione dei modelli CFD con la vasta area da studiare che inevitabilmente comporta problemi di tempi di calcolo;
3. una stima dell'impatto sulla salute dei residenti, effettuata mediante raccolta di dati sanitari disponibili e uso di software dedicati quali AIRQ+;
4. indicazioni per uno sviluppo sostenibile dell'area oggetto di studio..

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Roberto Nigro

**Supporting
information:**

**LA PRODUZIONE DI ALIMENTI FUNZIONALI PER VIA
BIOTECNOLOGICA**

La produzione di alimenti funzionali per via biotecnologica è l'ultima frontiera nel campo alimentare, ancora di più desiderata, dalla maggior parte delle aziende del settore per la crescente richiesta di alimenti per l'alimentazione degli intolleranti, allergici, dei vegetariani e dei vegani. A tale scopo, il dottorato ha lo scopo di mettere a punto bevande vegetali a partire da cereali, legumi, frutta secca con caratteristiche probiotiche e postbiotiche. Di particolare interesse, per il made in Italy, è lo sviluppo di bevande vegetali funzionali probiotiche e postbiotiche a base di mandorla materia prima elettiva per le industrie del sud-italia.

Il dottorato ha lo scopo nel primo anno di attività di individuare i microrganismi lattici in grado di fermentare le mandorle o semilavorati della stessa. Nel secondo anno si intende mettere a punto il protocollo a scala di laboratorio in reattori di tipo tradizionale per la massimizzazione degli elementi funzionali di interesse. Nel terzo anno, si intende mettere a punto protocolli di fermentazione che utilizzino la innovativa tecnica di fermentazione di tipo " misto" che utilizza microreattori/macrocapsule di alginato di sodio per lo sviluppo degli alimenti funzionali.

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Rossana
Pasquino

**Supporting
information:**

Potential partners to
involve may include:

- Prof. P. Fischer at
ETH Zurich
(Switzerland);
- Dr. Wim Pyckhout-
Hintzen at Jülich
Centre for
Neutron Science
(Germany);
- Prof. Dganit
Danino at CryoEM
Laboratory of Soft
Matter (Israel);
- Prof. Cécile Dreiss
group at the King's
College, London
(UK);
- Prof. Norman
Wagner group at
University of
Delaware (USA).

the Phd student will
spend at least 12
months at Jülich
Centre for Neutron
Science (Germany),
thanks to the already
existing collaboration
with Dr. Pyckhout-
Hintzen

**FAST DYNAMICS OF LINEAR AND BRANCHED WORMLIKE
MICELLAR SOLUTIONS**

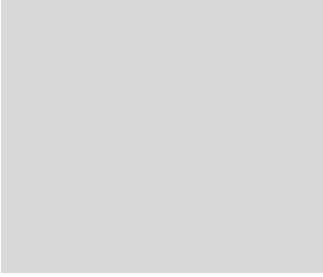
Micellar solutions are widely used in many application fields, in household and cosmetic products, as viscosity modifiers and fracturing liquids in oilfield applications. These systems are made up with amphiphilic molecules and, when dispersed in water, they assemble in different morphological structures, referred to as micelles. Micelles are tied together through simple physical attractions. It is possible to tune the micellar structures by changing surfactant concentration, salinity, pH and temperature. Another, very efficient way to obtain structural changes is adding a co-solute, which affects, via its electrostatic screening action and/or binding, the “size” of the surface area of the hydrophilic part. The flow properties of these micellar solutions, with limitations to the zero shear viscosity, have been widely studied in literature. It has been shown that, when keeping the surfactant concentration fixed, the zero shear viscosity shows a non-monotonic trend at increasing salt concentration. This is indicative of different morphologies arising in the system, from spheres to rods, from linear wormlike micelles (WLM) to branched systems.

The Cates model has shown to well describe the relaxation mechanism of WLM, known as living polymers, by considering two possible kinetics: a disentanglement process, typical of polymers, and a breaking and reforming mechanism. Unlike linear viscoelastic properties, the behaviour of WLMs in non-linear flows is almost unexplored. For example, WML show a very peculiar transient behaviour in start-up measurements, with the appearance of maxima for the shear and the first normal stress difference. A detailed description for the time-dependent flow of linear worm like micellar solutions is anyhow still missing.

The rheological behaviour of branched micelles is even more largely unexplored and no definitive mechanism for the relaxation mechanism has been suggested yet. Indeed, the branched points are themselves “living”, and they appear and disappear in time. Moreover, the response in the non-linear regime is almost unexplored, and only some branched wormlike micelles show strain hardening under strong flows, a feature that remains unexplained.

The experimental part will first deal with the selection of different surfactant solutions, which can be used as model systems for the rheological behavior. The solutions will be prepared by tuning surfactant and salt concentration. We will first focus on the linear rheological behaviour in a way to understand the kinetics involved in the relaxation mechanism. The transient behaviour of the micellar solutions in start-up flow will also be studied. Rheo-SANS will ensure quantitative measurements of the local microstructure under flow and will guarantee the possibility to link the macroscopic rheological measurement with the corresponding underlying microstructure.

The main objectives of the project are:

- 
1. Understanding how the micellar structure is connected to the chemical composition and geometry of the surfactants and how the structural features can be tuned to dictate the bulk properties
 2. Determining how much molecular-level information must be included to reproduce the proper rheology while still maintaining a tractable model. Constitutive models must be developed which include local effects on orientation and stretching of the WLM.

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Domenico Pirozzi
Prof.ssa Filomena
Sannino

Supporting information:

Collaborazioni con:

- Prof. Antonella Rossi (Università di Cagliari),
- Prof. Artur Valente (University of Coimbra, Dept. Chemistry, Portugal)

Periodo di permanenza di 3 mesi presso la Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) di Zurigo (Svizzera),
Periodo di permanenza di 4 mesi presso University of Coimbra (Portogallo).

SVILUPPO DI NANOMATERIALI MAGNETICI GREEN PER LA DEPURAZIONE DI ACQUE REFLUE

Negli ultimi anni i nanomateriali ibridi hanno suscitato grande interesse, in particolare per la possibilità di sintetizzare le nanoparticelle magnetiche (NPM), che trovano crescente applicazione nella rimozione di inquinanti da acque reflue, nella purificazione di miscele complesse, nella catalisi, ed in varie applicazioni teranostiche (targeting attivo di farmaci, diagnostica per immagini, varie terapie oncologiche).

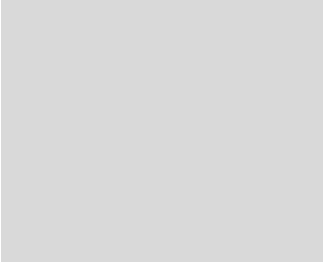
Un materiale particolarmente adatto per la produzione di NPM è il chitosano, la cui produzione è un esempio di economia circolare, in quanto è ottenuto dai residui della lavorazione dei crostacei. Il chitosano trova crescente applicazione in diversi settori (farmaceutico, alimentare, cosmetico, tessile, agricolo) grazie alle sue molteplici proprietà: è non tossico, antimicrobico, mucoadesivo, biocompatibile, biodegradabile. E' particolarmente interessante la prospettiva di impiegare il chitosano come bioadsorbente per la rimozione di inquinanti da acque reflue, in quanto la spiccata reattività dei gruppi amminici ed ossidrilici presenti sulle molecole di chitosano consente di modificarne le proprietà, rendendolo adatto all'interazione con un vasto range di inquinanti.

La magnetizzazione del chitosano viene realizzata mediante reticolazione o co-precipitazione con Fe₃O₄ (magnetite) o altri materiali magnetici. Particolare importanza hanno assunto le nanoparticelle SPIONs (Super Paramagnetic Iron Oxide Nanoparticles).

Obiettivo di questo progetto di ricerca è realizzare una più ampia valorizzazione del chitosano come bioadsorbente per la rimozione di inquinanti (ioni, sostanze organiche, biomolecole) da acque reflue. La sintesi di NPM di chitosano consentirà di superare i problemi di separazione dalla fase liquida che attualmente limitano l'applicazione della maggior parte dei materiali adsorbenti.

L'impiego di NPM con differenti caratteristiche morfologiche, termiche e magnetiche, consentirà di identificare soluzioni per diversi tipi di applicazione, attraverso l'analisi degli effetti dei parametri critici (dosaggio di adsorbente, pH, tempo di contatto, temperatura) sulla cinetica e sulle condizioni di equilibrio del processo di adsorbimento. Per la caratterizzazione morfologica, meccanica e funzionale dei materiali si utilizzeranno la microscopia elettronica a trasmissione (TEM) e scansione (SEM), la spettroscopia ad infrarossi in trasformata di Fourier (FT-IR), l'analisi termogravimetrica (TGA), la spettroscopia fotoelettronica a raggi X (XPS). Per determinare le proprietà magnetiche delle nanoparticelle si effettueranno analisi di magnetometria a campione vibrante (VSM).

Particolare attenzione verrà dedicata al comportamento del chitosano in presenza di sistemi multicomponente che simulino il comportamento delle acque reflue contenenti più inquinanti. Sarà verificata anche l'inerzia biologica delle NPM di chitosano (capacità di impedire la formazione di biofilm sulla superficie esterna) che rappresenta un presupposto essenziale per l'applicazione industriale.



Le proprietà del chitosano magnetico verranno migliorate attraverso la sintesi di materiali ibridi chitosano-grafene, in modo da sfruttare anche le capacità adsorbenti e l'elevata superficie specifica del grafene. Saranno sviluppate metodologie di desorbimento per consentire il riciclo dell'adsorbente esausto, e nel contempo il recupero oppure il corretto smaltimento degli inquinanti.

Advisor:

Prof. Fabrizio Scala

**Supporting
information:**

Cooperation with suitable Italian and foreign research laboratories will be established with a specific focus to develop tailored attrition-resistant sorbent particles.

A 3-6 months stay at a foreign research laboratory will be required during the PhD, most likely at the end of the 2nd year or at the beginning of the 3rd year. This stay will involve a research activity to develop tailored attrition-resistant sorbent particles.

ADVANCED SORPTION-ENHANCED PROCESSES IN FLUIDIZED BED REACTORS

Sorption-enhanced (SE) processes have gained recent interest, especially in the energy-related field, since they allow for increased productivity by shifting chemical equilibrium using a solid sorbent. This concept has been successfully applied e.g. to combustion, gasification, reforming and methanation. Different SE processes have been proposed where the sorbent removes a gaseous species, e.g. CO₂, O₂ or H₂O, from the reacting environment. Since the saturated sorbent needs to be regenerated, such processes all involve cyclic operation. In order to carry out the operation in a steady apparatus, fluidized bed reactors must be used so that the sorbent particles could be easily and continuously transferred from the main reactor to the regeneration reactor and vice versa.

The sorbent particles must comply to a number of requirements to be considered for practical operation. They must have a high capture capacity, good mechanical and thermal resistance, be non-toxic, and as cheap as possible. Both natural ores and synthetic sorbents have been considered as potential candidates to date.

In this thesis new sorption-enhanced processes will be developed using advanced chemical looping schemes in fluidized bed reactors. The research activity will require, after a thorough literature review, the analysis of thermodynamic and kinetic limitations of possible sorbent-gaseous species pairs, taking into account unwanted side-reactions with other gaseous compounds. Once the processes and suitable sorbents have been selected, the SE concept will be experimentally studied in available lab-scale dual fluidized bed reactors. The experimental activity will consist in the characterization of the behavior of the sorbent particles during repeated cycles, in terms of reaction rate, maximum conversion, attrition rate and fragmentation of the sorbent particles, as a function of the reaction temperature, gas species concentration and amount of sorbent. The occurrence of possible side reactions in the temperature range of interest will also be studied.

Finally, techno-economic analysis and life cycle assessment of the selected SE processes will be performed to understand the feasibility with respect to existing technologies.

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Andrea D'Anna

**Supporting
information:**

Activities are performed in the framework of the Air Force Office of Scientific Research (AFOSR) project GRANT13271252

Cooperation with Stanford University, prof. Hai Wang group

**COKE, SOOT, AND INTERSTELLAR CARBON DUST:
OPTOELECTRONIC SIGNATURES OF NANO-CARBON AND
POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN THE PRESENCE
OF H ATOMS**

Formation of carbon nanomaterials in flames, in high-temperature fuel pyrolysis or in interstellar media has attracted wide-ranging, cross-disciplinary interests. Recently, we have shown that carbon nanoparticles (CNPs) formed from highly reactive hydrocarbon flame environments exhibit quantum confinement behaviors. The finding has several important implications and offers an important path to unraveling the mechanism of carbon nucleation and growth in a reacting fluid. The quantum confinement effect is also important to new material discovery for applications in solar cells, light emitting diodes, hydrogen storage, biological labeling, sensors and catalysis.

A basic understanding of the process-structure-property relationship remains unavailable. In particular, relevant pathways to and mechanisms of the early stage of carbon nucleation and growth are not yet well established. Of the many structure properties, the carbon hybridization and H/C ratio play a critical role in the reaction mechanism and rates, and also in the optoelectronic properties of the resulting carbon materials. From problems ranging from endothermic cooling and fuel cracking, soot formation in flames, to the formation of carbon dust in interstellar media and nanocarbon materials of tailored application, a common characteristic is the interaction with hydrogen, which under reacting condition forms hydrogen atoms. The interplay between the molecular building block of condensed-phase carbon, namely polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), and the hydrogen atom has been hypothesized to play a significant role in both the pathway to a certain carbon structure and its optoelectronic properties.

Recent studies on graphene hydrogenation and some new experimental evidences on chemical bonds intermediate between a pure covalent bond and a van der Waals interaction, as shown in self association of highly delocalized phenalenyl-like radicals, led us to hypothesize that the formation of PAH interlayer C-C bonding by sp^3 hybridization, leading to pancake and covalent bonding, occurs through a molecular catalytic process facilitated by the H atom, which is abundant in reactive fluids, or from the peripheral sp^3 carbon with hydrogen termination. Our recent unpublished results of H-atom addition to carbon particles seem to support the hypothesis. Indeed, high resolution scanning tunneling microscopy (STM), and scanning tunneling spectroscopy (STS) measurements performed on carbon flame-formed nanoparticles under hydrogen exposure show a change of their characteristics from semi-conductive to semi-metallic. The addition of an H-atom to the double bond on five-membered ring PAH is facile and can offer source of the hydrogen atom, which diffuses into the interlayer region to facilitate binding. Our unpublished results even show that the process of H-atom addition shows reversibility of band-gap reduction in the case of

relatively short hydrogen exposure. It might be possible that for shorter exposure time, hydrogenated radicals were formed but may reverse back at a later time. In contrast, the longer exposure time may lead to π/σ bonding among hydrogenated PAH radicals forming stable dimers. The various pieces of evidence lay the foundation for the work here proposed. We plan to investigate the interaction mechanism of nano-carbon structures with the H atom and its resulting impact on the optical and electric behavior of these structures. The experiment is aimed at identifying if and how the interaction with H atoms promotes carbon structural transformation through the formation of π -stacking among PAHs, leading to strong binding and thus nucleation of carbon structures at high temperatures. The experiment will allow for a basic understanding of initial interlayers bonding in carbon materials formed at high temperatures. The theoretical/calculative work - DFT with hybrid functional and localized Gaussian basis set (B3LYP/6-31G**) - will help understanding the detailed cluster structure by comparison of calculated and measured HOMO–LUMO gaps that have been found to be affected by cluster configuration.

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Mariano
Sirignano

**Supporting
information:**

Collaborazione con
CNR-Stems per la
caratterizzazione
chimico-fisica del
particolato.

Collaborazione con
POLIMI per lo sviluppo
di un software per
l'analisi
multiparametrica dei
dati di
caratterizzazione
chimico-fisica del
particolato.

Periodo di ricerca
all'estero presso
l'Università di
Darmstadt in
Germania per la
produzione di
particolato da
combustibili
alternativi in fiamme
turbolente (6 mesi- di
preferenza all'inizio
del terzo anno)

**CHEMICO-PHYSICAL ANALYSIS OF COMBUSTION-FORMED
CARBONACEOUS PARTICLE FEATURES AND THEIR
CORRELATION TO FUEL STRUCTURE FOR RENEWABLE AND
ALTERNATIVE FUELS**

L'Unione Europea è impegnata nello sviluppo e nell'uso di combustibili alternativi che possano contemporaneamente contribuire alla sicurezza dell'approvvigionamento energetico, alla sostenibilità e alla competitività dell'energia per i trasporti. La direttiva sulle energie rinnovabili 2018/2001/UE prefigge una quota del 14% nell'utilizzo di energia rinnovabile nei trasporti entro il 2030, spingendo per l'introduzione di combustibili alternativi in settori difficili da decarbonizzare come i trasporti pesanti, l'aeronautica e il trasporto navale. D'altra parte, l'abbattimento delle emissioni inquinanti rappresenta un impegno centrale nell'agenda politica dell'UE e sta portando a limitazioni sempre più stringenti per le emissioni di particolato, che prevedono un controllo non solo sulla quantità del particolato emesso ma anche sulla concentrazione numerica di particelle ultrafini (UFP), cioè, al di sotto di 100 nm. Sebbene oggi sia ben assodato che i combustibili con funzionalità ossigenate quali i combustibili alternativi riducano la massa totale di particolato emesso rispetto ai combustibili fossili, recenti campagne sperimentali hanno mostrato chiaramente che il numero di UFP emesse aumenta. Le UFP rappresentano un grave rischio per la salute, in quanto, grazie alle loro piccole dimensioni, possono penetrare più a fondo nei polmoni. I pochi studi scientifici sull'argomento hanno evidenziato che gli effetti biologici/tossicologici di tali UFP dipendono dalla struttura molecolare e dalla quantità di specie ossigenate presenti nel combustibile. Purtroppo, i meccanismi alla base di tali processi sono tuttora poco noti. Con il crescente interesse nell'utilizzo dei combustibili ossigenati, quali quelli derivanti da trattamento di biomassa o da riutilizzo della CO₂ catturata, è chiara l'esigenza di studiare in modo sistematico le emissioni di UFP da tali combustibili. La presente proposta progettuale mira a caratterizzare la formazione e l'evoluzione delle UFP dalla combustione di combustibili alternativi di nuova generazione attraverso la combinazione di svariate tecniche sperimentali.

I combustibili alternativi saranno selezionati sulla base dei diversi gruppi funzionali che li caratterizzano (alcoli, eteri, chetoni e idrocarburi ossigenati ciclici) saranno utilizzati in varie percentuali in miscela con combustibili convenzionali in fiamma su scala di laboratorio. Nella prima parte del progetto dopo un'analisi della letteratura presente sarà individuata un pool di combustibili alternativi di interesse. Una volta stabiliti i combustibili alternativi di interesse, saranno condotte analisi della temperatura e della fase gassosa dei principali prodotti e sottoprodotti della combustione (specie gassose C₁ a C₆ e degli idrocarburi policiclici aromatici). Successivamente l'attenzione sarà volta alle misurazioni della concentrazione totale in massa e della funzione di distribuzione dimensionale del particolato (spettroscopia ottica in situ e

analisi ex situ della mobilità differenziale). Ciò consentirà di quantificare accuratamente l'effetto del gruppo funzionale del combustibile e della sua concentrazione nella miscela di alimentazione sulla qualità e la quantità delle emissioni particellari. Infine si procederà alla caratterizzazione strutturale e morfologica dei campioni UFP avverrà attraverso l'uso combinato di tecniche diagnostiche avanzate per studiarne la reattività (termogravimetria) e l'aromaticità (spettroscopia Raman e UV-Visibile). Inoltre la spettroscopia infrarossa fornirà importanti dettagli sui gruppi funzionali presenti sulla superficie della particelle che potrebbero promuovere una loro maggiore reattività non solo all'ossidazione ma anche alle interazioni con i sistemi biologici.

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Giancarlo Sorrentino

Supporting information:

Collaborazione con Università di Pisa, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", Darmstadt University, Germania; ULB, Belgio; Lund University, Svezia; TuE Eindhoven University, Paesi Bassi; Cambridge University, UK

Periodo di ricerca di 6 mesi all'estero presso uno dei seguenti istituti di ricerca/università: Eindhoven University of Technology (TuE), Eindhoven, Paesi Bassi; Université Libre de Bruxelles, Bruxelles, Belgio.

CYBER-INFRASTRUTTURE CLOUD EMBEDDED PER IL CONTROLLO E L'OTTIMIZZAZIONE DI PROCESSI INNOVATIVI DI CONVERSIONE TERMOCHIMICA

Il fenomeno della digitalizzazione ha investito ogni ambito della società odierna determinando un forte progresso scientifico legato all'introduzione di concetti e tecnologie informatiche innovative. L'introduzione di tali sistemi ha cambiato in maniera radicale ed esponenziale le prospettive di sviluppo dell'industria tramite concetti fortemente innovativi e, potenzialmente, capaci di plasmare i sistemi produttivi e l'organizzazione economica e sociale. Infatti, concetti quali "Big Data", "Machine Learning", etc., hanno fatto sì che le odierne infrastrutture informatiche rendano possibile immaginare e creare i cosiddetti "Digital Twins", letteralmente gemelli digitali, che permettono la replica digitale di sistemi fisici migliorandone caratteristiche, sostenibilità e affidabilità. Parallelamente, è cambiata anche la ricostruzione dello stato dinamico dei sistemi per mezzo di reti di sensori intelligenti che permettono di rivelare i valori assunti da variabili di processo, difficili da misurare, per mezzo di predittori ideati tramite logiche di sistemi di apprendimento basati su reti neurali artificiali e affiancati da sistemi intelligenti di gestione e interrogazione di banche dati e procedure di Data Mining.

E' diffusa la percezione, ma anche la consapevolezza, che nel prossimo futuro essi diventeranno un pilastro imprescindibile di attività produttive e saranno massicciamente utilizzati in tutti i sistemi industriali e nei beni di consumo.

In tale contesto, è importante al contempo sviluppare nuovi processi e tecnologie capaci di soddisfare e raggiungere gli obiettivi fissati nell'agenda 2030 inerenti allo sviluppo sostenibile, realizzando processi ed impianti "Green" in grado anche di rientrare in un discorso di "Circular Economy Action Plan".

Lo scopo del progetto di ricerca è quello di realizzare una "Cyber-infrastruttura Cloud Embedded" implementabile nel contesto dei processi termochimici avanzati per l'utilizzo di vettori energetici alternativi.

In particolare lo sviluppo della Cyber-infrastruttura menzionata si focalizzerà su processi e impianti di combustione in regime di condizioni MILD che, integrata in un contesto Cloud, possa prevedere la configurazione di un modello "Digital Twin" e di adeguati "Soft-Sensors", sviluppando una metodologia di alta performance in grado governare ed ottimizzare condizioni di processo.

L'obiettivo di tale strategia è focalizzato sulla realizzazione di un sistema avanzato in grado di prevenire ed agire tempestivamente sul verificarsi di condizioni di eventi catastrofici o di condizioni di instabilità di processo ed al tempo stesso ottimizzare condizioni di processo e di impianto in termini di sostenibilità ambientale ed economica.

Di seguito sono riportati le principali attività ed obiettivi della proposta di ricerca:

1. Analisi e studio di letteratura su sistemi di acquisizione dati in real-time guidati da AI, strutture cloud, modelli Digital-Twin e Soft-sensors per processi reattivi;
2. procedure di data mining sperimentali e metodi avanzati di data visualization;
3. tecniche di deep learning tramite Artificial Neural Network (ANN) e metodologie di clustering per lo sviluppo di modelli ibridi "data-physics driven" di predizione e riconoscimento di dinamiche di processo;
4. comparazione real-time di dati sperimentali e simulazioni numeriche;
5. modello digitale del processo;
6. soft sensors per la determinazione di condizioni di malfunzionamento, ottimizzazione del processo e dell'impianto;
7. implementazione del sistema cloud
8. comando dell'impianto da remoto con gestione della cyber-infrastruttura
9. verifica e collaudo della Cyber-infrastruttura dei Processi Chimici Cloud-embedded
10. test di acquisizione

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Giancarlo Sorrentino

Supporting information:

Collaborazione con Istituto di Scienze e Tecnologie per l'Energia e la Mobilità Sostenibili (STEMS) del CNR, Università di Pisa, Università di Roma "La Sapienza", Darmstadt University, Germania; ULB, Belgio; Lund University, Svezia; TuE Eindhoven University, Paesi Bassi; Cambridge University, UK

Periodo di ricerca di 6 mesi all'estero presso uno dei seguenti istituti di ricerca/università: Eindhoven University of Technology (TuE), Eindhoven, Paesi Bassi; Université Libre de Bruxelles, Bruxelles, Belgio.

SVILUPPO E APPLICAZIONE DI METODOLOGIE DI "SENSING" AVANZATO PER IL CONTROLLO E LA DIGITALIZZAZIONE VIRTUALE DI PROCESSI REATTIVI

Nel quadro di strategie innovative di monitoraggio e controllo di tecnologie di conversione termochimica, la disponibilità di sensori veloci, affidabili ed economici svolge un ruolo essenziale.

In tal senso, le diagnostiche molto sofisticate disponibili in letteratura sono applicabili solo per ottenere dati relativi alle variabili di processo da esperimenti su scala di laboratorio in condizioni molto specifiche.

Inoltre, l'elevata risoluzione temporale necessaria alla misurazione di opportuni "marker" del processo reattivo, ostacola la misurazione delle concentrazioni di specie principali risolte nel tempo in punti chiave in casi realistici quali ad esempio i sistemi industriali. Inoltre, il costo associato all'uso di dispositivi analitici online con una sufficiente risoluzione temporale/specifica è escluso da un'analisi di compromesso del potenziale beneficio del processo e dell'investimento economico richiesto.

Gli approcci di soft sensing rilassano in parte la necessità di tali diagnostiche ad alte prestazioni per l'ottenimento di dati rilevanti ai fini del controllo dei processi reattivi. D'altra parte, essi richiedono un modello numerico risolto sia nello spazio che nel tempo del sistema (ad esempio ottenuti da una modellazione CFD del sistema reattivo) che sia in grado di ricostruire in tempo reale i marcatori critici del processo a partire da un numero sufficiente di misurazioni di altri parametri. Questo approccio non è nuovo nei processi termochimici. Tuttavia, in passato sono state generalmente utilizzate metodologie statistiche, basate sulla correlazione semi-empirica di quantità di interesse e di quelle effettivamente misurate. Questi metodi hanno il vantaggio di essere molto veloci e facili da usare.

Partendo da queste considerazioni sta diventando popolare l'idea di utilizzare un cosiddetto approccio tipo "Digital Twin" per il monitoraggio e il controllo di sistemi in evoluzione dinamica. La progettazione di un sistema di controllo basato sulla disponibilità di un gemello digitale richiede la disponibilità di un modello numerico risolto nel tempo del sistema in esame. Tale modello, a sua volta, deve interagire in tempo reale con un numero adeguato di sensori e attuatori per ottenere dati rilevanti del processo in esame in grado di descrivere con sufficiente dettaglio lo stato del sistema e di consentirne una corretta ed efficace strategia di controllo.

Di seguito sono riportati le principali attività ed obiettivi della proposta di ricerca:

- Analisi e studio di letteratura su sistemi di acquisizione dati in real-time guidati da AI, strutture cloud, modelli Digital-Twin e sensori avanzati per processi reattivi;
- Analisi e studio delle principali metodologie diagnostiche (ottiche e/o chimiche) per l'ottenimento di dati di processo da sistemi di combustione innovativi;

- Studio delle metodologie di analisi per l'ottenimento di opportuni "marker" del processo reattivo da diagnostiche risolte spaziotemporalmente;
- Analisi delle metodologie di simulazione numerica (CFD time-resolved) per la modellazione e la prototipazione di un combustore in scala da laboratorio utilizzato come test-case;
- creazione del modello digitale del processo in esame;
- analisi e metodologie per l'identificazione di opportuni soft sensors per il monitoraggio ed il controllo del sistema;
- Analisi sperimentali e campagne sperimentali sul combustore in scala da laboratorio per ottenere un database "consistente" alla fine dello sviluppo di un digital-twin del processo in esame.
- ottenimento di un modello ridotto (ROM) del sistema tramite l'utilizzo combinato delle misurazioni sperimentali e dei dati di modellazione (CFD)
- verifica del modello ridotto e del gemello digitale attraverso ulteriori campagne sperimentali per la predizione/controllo delle condizioni di lavoro e malfunzionamenti del processo

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Giovanna
Tomaiuolo

Supporting information:

Collaborazione con
Achille Iolascon,
professore ordinario
di Genetica Medica
presso l'Università
degli Studi di Napoli
"Federico II", PI del
gruppo di Genetica
Medica delle malattie
dell'età evolutiva
presso il CEINGE -
Biotecnologie
Avanzate (Napoli).

Collaborazione con
Pietro Cicuta,
professore presso
l'University of
Cambridge, the
Cavendish Laboratory,
Department of
Physics, Chair IOP
Biological Physics
group and co-PI of the
Center for Physical
Biology in Cambridge.

Periodo di ricerca di 6
mesi all'estero presso
Biological and Soft
Systems del
Department of Physics
dell'Università di
Cambridge, UK, sotto
la supervisione
tutoriale del Prof.
Pietro Cicuta

ANALISI DEL TRASPORTO SANGUIGNO IN CONDIZIONI MICROCONFINATE PER APPLICAZIONI BIOMEDICHE

La ricerca è focalizzata sull'analisi del flusso sanguigno in canali microfluidici, aventi dimensioni paragonabili a quelle del sistema vascolare del microcircolo. Possibili applicazioni di questo studio sono nello sviluppo di tecnologie miniaturizzate per diagnosi e terapie. In entrambi i casi, la crescente domanda di dispositivi più sostenibili ed accessibili sta spingendo verso lo sviluppo di soluzioni del tipo point-of-care (POC) attraverso la miniaturizzazione delle tecnologie attualmente in uso, spesso basate su apparecchiature con alti costi di esercizio. Nonostante il semplice scaling down dei dispositivi possa sembrare scoraggiante, la sfida è l'utilizzo dei più recenti progressi nel campo della processazione avanzata dei materiali e della microfabbricazione, come l'additive manufacturing e la soft-lithography, per creare complesse strutture 3D nella scala della microcircolazione, dove avviene la maggior parte degli scambi fisiologici tra sangue e tessuti. Nonostante questo, un approccio soddisfacente alla miniaturizzazione dei dispositivi biomedicali ispirato dalla micro-fisiologia non è attualmente disponibile, a causa dell'ancor limitata conoscenza e comprensione del trasporto del sangue in condizioni confinate, dove la natura particellare del sangue dà origine ad una serie di fenomeni complessi, dall'eterogenea distribuzione cellulare nei piccoli vasi a fenomeni di fouling e a risposte fortemente non lineari. Una delle applicazioni di interesse è l'emodialisi, utilizzata per la filtrazione del sangue in casi di insufficienza renale. Basandosi sull'esperienza pregressa sul flusso sanguigno in microcanali, questa proposta di progetto di dottorato di ricerca è dettata dall'esigenza di un'analisi integrata dei meccanismi che governano il trasporto del sangue e più in particolare dei globuli rossi in geometrie complesse in vitro. Gli obiettivi principali possono essere così riassunti: 1) analisi quantitativa del flusso confinato del sangue, in particolare delle interazioni cellula-cellula e cellula-topologia; 2) analisi quantitative del trasporto di calore e di materia del sangue, includendo processi filtrazione con membrana e biofouling; 3) sviluppo di strategie per il controllo del flusso sanguigno tenendo in considerazione gli effetti di stati patologici del sangue, come alterata deformabilità e aggregazione dei globuli rossi.

In particolare, i tre anni di dottorato potrebbero essere sviluppati seguendo il seguente programma di lavoro:

- Mesi 1-12. Studio della letteratura riguardante il trasporto del sangue/globuli rossi in condizioni microconfinite, il trasporto in mezzi porosi (per la parte di filtrazione) e reologia del sangue. Partecipazione a seminari e scuole sull'argomento, approccio in laboratorio a tecniche microfluidiche e di microfabbricazione, microscopia e analisi dell'immagine.
- Mesi 13-24. Progettazione e realizzazione di una piattaforma microfluidica atta a mimare la microcircolazione sanguigna. Particolare attenzione sarà dedicata all'endotelializzazione dei microcanali. Analisi

del trasporto di globuli rossi nella rete di microcanali in condizioni assimilabili a quelle fisiologiche, con particolare attenzione all'interazione dei globuli rossi con le pareti endoteliali, su campioni sani e patologici. Periodo di ricerca all'estero riguardante l'interazione tra globuli rossi e parassita della malaria.

- Mesi 25-36. Integrazione della piattaforma microfluidica con una membrana microporosa in modo da poter mimare la filtrazione sanguigna e con sensori innovativi (tipo OECT) per il controllo dello stato di salute dei globuli rossi. Scrittura della tesi.

**Ingegneria
Chimica**

Advisor:

Prof. Gaetano D'Avino
Prof. Daniele
Tammaro
Prof. Pier Luca
Maffettone

**Supporting
information:**

Possible collaborations with the Technische Universiteit of Eindhoven (The Netherlands) and a couple of companies (PaperFoam, Sulzer, Gurit) are expected.

From six to nine months to be spent at a University or research center abroad are planned.

Possible hosts are:

- Technische Universiteit of Eindhoven (The Netherlands)
- University of Minho (Portugal)

**MODELING AND SIMULATION OF EXTRUDATE SWELL OF
COMPLEX MATERIALS**

Polymer melts exiting a nozzle exhibit the well-known die swell phenomenon, i.e., the enlargement of the cross-section as compared with that of the die. Such a phenomenon, caused by fluid elasticity, alters the extrudate shape and has a relevant impact on the quality of the final product. Due to the huge number of industrial products made by extrusion, the extrudate swelling is a world-wide studied problem. So far, die swelling has been mainly investigated for axisymmetric shapes. For geometries with sharp edges, swelling is much more critical as elasticity "rounds" the corners of the extrudate cross-section. Hence, the production of extrudates with corners is not easy and requires modifications of the die cross-section, generally based on previous experiences or trial-and-error. A predictive tool aimed at designing the correct die geometry leading to a desired extrudate shape is needed to save costs and speed-up the processing stage.

The objective of this project is to set-up, validate, and use a numerical tool able to predict the die swell of complex materials flowing in a die with a complex shape. A single-phase viscoelastic fluid will be first considered to understand the effect of the normal stresses on the swelling in presence of sharp edges of the cross-section. The second part of the project will focus on extrusion of multiphase materials, e.g., viscoelastic suspensions and foams.

The planned activities are:

1-3 months: analysis of existing literature with focus on constitutive equations for viscoelastic fluids and available works for non-axisymmetric dies

4-12 months: selection of the numerical method to accurately simulate the die swell phenomenon, set-up and validation of the simulation tool

13-24 months: application of the numerical tool to single-phase viscoelastic fluids and complex die shapes with sharp edges

25-36 months: application of the numerical tool to simulate the extrudate swell of viscoelastic suspensions and foams

Ingegneria Chimica

Advisor:

Prof. Sergio Caserta

Supporting information:

Il progetto di dottorato si inserisce nell'ambito di attività di ricerca già in corso:

- Progetto Finanziamento Ricerca di Ateneo FRA 2020: ROTOR
- Topical Team dell'Agenzia Spaziale Europea (ESA): Biofilm from a multidisciplinary perspective.

Per il periodo all'estero sono previste diverse possibilità:

- Aristotele University of Thessaloniki in Grecia, Prof. Thodoris Karapantsios
- INRAE Parigi, Prof. Romain Briandet
- CNRS Lione in Francia, Prof. Sigolene Lecuier

RUOLO DELLE CONDIZIONI AMBIENTALI SULLA MOTILITÀ BATTERICA E SULLA FORMAZIONE DI BIOFILM

I biofilm sono gel polisaccaridici tipicamente generati dall'attività di batteri adesi a superfici solide. I biofilm sono considerati responsabili di contaminazioni e corrosioni di impianti industriali e dei sistemi di distribuzione dell'acqua potabile, ma anche di compromettere le funzionalità di apparecchiature biomedicali e dell'insorgenza di infezioni e malattie del corpo umano.

È importante investigare in dettaglio il ruolo delle condizioni ambientali sull'evoluzione di questi sistemi biologici, ed il ruolo degli stimoli meccanici sulla motilità cellulare e sulla formazione del biofilm.

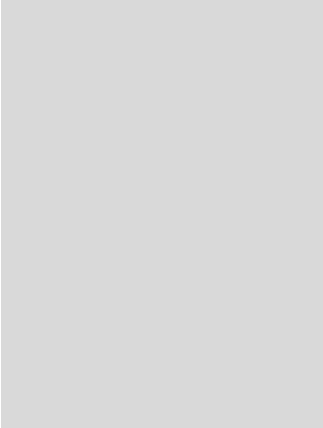
Malgrado la sua rilevanza, il problema non è stato investigato in maniera sistematica e non è tuttora chiaramente compreso.

In particolare, non è noto l'effetto degli sforzi legati al flusso o alla gravità su motilità batterica e morfologia dei biofilm, aspetti particolarmente rilevanti per applicazioni legate alla contaminazione di canali, superfici inclinate sommerse, sistemi soggetti ad accelerazioni, e ad applicazioni legate all'esplorazione spaziale. In riferimento alle applicazioni spaziali, i biofilm sono stati identificati come la principale causa del biofouling microbico e della corrosione di diversi apparecchi a bordo della ISS, nonché di infezioni e patologie umane sviluppatesi in orbita. Alcuni studi preliminari sul tema svolti in microgravità hanno riportato risultati contraddittori, facendo emergere molte lacune sulle metodologie e tecniche usate.

Al fine di contrastare la formazione di biofilm, sono disponibili diverse tecnologie. Tra queste l'uso di Peptidi Anti-Microbici è una alternativa agli antibiotici convenzionali, che riduce la resistenza batterica indotta. Ingegnerizzando le superfici è possibile evitare l'adesione delle cellule batteriche. Ciò può essere fatto utilizzando metodi fisici o chimici, inclusa la tecnica del plasma freddo a radiofrequenza, che è in grado di ionizzare permanentemente le superfici, creando un effetto ossidativo che compromette le attività batteriche, o che può essere utilizzato per legare in maniera covalentemente molecole, come i peptidi, ottenendo delle superfici funzionalizzate stabilmente.

Lo scopo del progetto è quello di indagare il ruolo di stress chimici (AMP), fisici, e meccanici (flusso o gravità), sulla morfologia del biofilm e sulla motilità batterica. Saranno utilizzate tecniche basate sulla visualizzazione diretta del flusso usando dispositivi microfluidici, microscopia avanzata, ed analisi delle immagini. Al fine di inibire o controllare la formazione di biofilm sulle superfici, verranno esaminate le proprietà di peptidi antimicrobici sia in soluzione che mediante innesto su superfici solide, usando tecniche basate sul plasma freddo.

Il candidato ideale dovrà avere esperienza sull'applicazione dei principi dell'ingegneria chimica (in particolare fenomeni di trasporto) a sistemi di interesse biomedico e/o biotecnologico, conoscenze di base di biologia sono considerate utili.



Durante il primo anno verrà definita la metodologia sperimentale, sviluppando una cella di flusso microfluidica. Nel secondo anno la metodologia verrà applicata sistematicamente, anche beneficiando di collaborazioni con altri gruppi del dipartimento, grazie ad un progetto di ricerca già finanziato. Nel terzo anno si prevede anche un periodo all'estero, focalizzando il lavoro per applicazioni legate al campo dell'esplorazione spaziale.

I risultati del progetto avranno potenziali ricadute in campo biomedico, nell'ambito del biorisanamento e del biofouling industriale, e anche di applicazioni di frontiera scientifica, quali quelle legate alle missioni di lunga durata per l'esplorazione spaziale.

Tecnologie e Sistemi di Produzione

Advisor:

Prof. Luigi Nele

Supporting information:

Durante lo sviluppo del progetto saranno coinvolte le seguenti aziende:

- Siemens SpA;
- gruppo AVIO/GE SpA;
- gruppo Leonardo SpA;
- De Iulii SpA, Fisciano;
- Entalpia MG Srl, Marcianise;
- CPS SpA, Fisciano.

Nell'ambito della collaborazione con Siemens per la digitalizzazione dei sistemi, è previsto lo svolgimento di parte delle attività presso le sedi Siemens in Germania.

SALDATURA 4.0

Il progetto di ricerca prevede lo sviluppo di un sistema evoluto di controllo della saldatura nel settore delle leghe speciali.

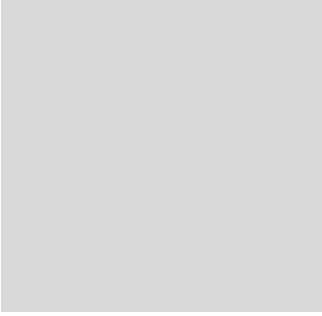
La saldatura per fusione con arco elettrico a filo continuo sotto assistenza di gas è una tecnologia estremamente diffusa anche in settori ad elevata criticità. Proprio per tali settori è necessario lo sviluppo di controlli evoluti, basati su tecniche di acquisizione e trattamento immagini, anche termografiche, che possano determinare il ciclo termico di raffreddamento, fondamentale per controllare l'evoluzione della struttura metallurgica del cordone di saldatura e del materiale adiacente.

Allo stato attuale non sono noti sistemi per il rilievo del ciclo di raffreddamento del cordone di saldatura.

Da indagini preliminari è stato verificato che le tecniche termografiche sono potenzialmente idonee al controllo in tempo reale della qualità della saldatura e per il controllo mediante tecniche di Intelligenza Artificiale, IA, dei parametri di saldatura. In particolare, si ritiene di poter mettere in relazione la struttura metallografica con il ciclo termico di raffreddamento nell'intervallo di temperatura da circa 850 °C a circa 400 °C. La criticità è rappresentata dalla corretta scelta dei sistemi HW, i.e. termocamere, e dallo sviluppo degli opportuni algoritmi di trattamento immagine per definire la risoluzione del sistema negli specifici casi applicativi.

Il progetto prevede lo sviluppo delle seguenti fasi:

1. Analisi di sistemi di controllo della saldatura in tempo reale e della tecnologia corrente;
2. Studio delle tecniche termografiche per il rilievo della temperatura in tempo reale;
3. Sviluppo di un sistema di monitoraggio della saldatura basato sull'acquisizione ed elaborazione di immagini termografiche;
4. Studio di sistemi di monitoraggio basati su sensori di emissione acustica. Analisi del campo acustico durante il processo di saldatura, finalizzato al monitoraggio della metallurgia nella Zona Fusa e nella Zona Termicamente Alterata, ZF/ZTA. L'obiettivo è realizzare un sistema di controllo sensoriale integrato;
5. Studio dell'impiego di ultrasuoni per migliorare le caratteristiche metallurgiche del giunto. Si intende sviluppare un sistema basato su sonda ad ultrasuoni per indurre un effetto hammering in prossimità della zona fusa per migliorare le caratteristiche metallurgiche della ZF.
6. Studio ed analisi delle caratteristiche metallurgiche in funzione del ciclo di raffreddamento e correlazione con i parametri di processo;

- 
7. Implementazione di un sistema di IA per la gestione dei parametri di processo quali Tensione, Corrente, velocità di avanzamento del filo, velocità di avanzamento della torcia, tipologia del gas di assistenza e portata;
 8. Sviluppo di modelli Digital Twin basati sulla fisica semplificata del processo;
 9. Analisi di fattibilità di sistemi di movimentazione robotizzata della torcia di saldatura.

Tecnologie e Sistemi di Produzione

Advisor:

Prof. Luigi Nele

Supporting information:

Durante lo sviluppo del progetto saranno coinvolte le seguenti aziende:

- gruppo Leonardo SpA;
- LAER SpA, Airola;
- De Iuliis SpA, Fisciano.

Nell'ambito dello sviluppo del progetto saranno individuati partner europei, universitari e non, per lo sviluppo di specifiche attività nel settore del controllo dei sistemi di movimentazione automatizzata /robotizzata.

SISTEMI DI CONTROLLO AUTOMATIZZATO CON LIQUIDI PENETRANTI NELLA FABBRICAZIONE DI STRUTTURE AERONAUTICHE

Il progetto di ricerca prevede lo sviluppo di un sistema intelligente di controllo mediante liquidi penetranti.

I liquidi penetranti vengono impiegati per il controllo superficiale di particolari prodotti mediante diverse tecnologie nei settori aeronautico, meccanico e navale. Ad esempio, nel settore aeronautico il controllo con liquidi penetranti viene impiegato a valle del trattamento di ossidazione anodica delle lamiere strutturali di fusoliera; nei settori meccanico e navale il metodo dei liquidi penetranti viene impiegato per il controllo della saldatura di elementi strutturali. Attualmente, il processo prevede fasi di preparazione degli elementi e della deposizione di polveri e liquidi con metodologie rigidamente controllate, ma sostanzialmente manuali. Inoltre, il controllo vero e proprio viene eseguito da un operatore qualificato mediante ispezione visiva, con o senza illuminazione dedicata, i.e. luce UV. È di chiara evidenza che tale controllo rappresenta una fonte di forte rallentamento nei processi produttivi in cui deve essere impiegato. Inoltre, la valutazione soggettiva è per sua stessa natura fonte di incertezza. Alla luce di tali considerazioni sistemi automatizzati intelligenti di controllo con liquidi penetranti basati su sistemi di visione artificiale possono costituire un valido supporto alla decisione dell'operatore.

Da indagini preliminari è stato verificato che le tecniche di visione con telecamere possono essere efficacemente impiegate per acquisire immagini di superfici trattate con i liquidi penetranti sia con illuminazione UV che naturale. Tecniche di condizionamento e trattamento di immagini insieme con l'addestramento di sistemi di intelligenza artificiale sono in grado di supportare, ed in futuro sostituire, il controllo visivo attualmente effettuato.

Il progetto prevede lo sviluppo delle seguenti fasi:

1. Analisi di sistemi di controllo con liquidi penetranti nel settore aeronautico e meccanico/navale.
2. Analisi dei requisiti di sistema;
3. Studio delle tecniche di illuminazione e rilievo immagine delle superfici trattate;
4. Sviluppo delle procedure di condizionamento e trattamento delle immagini acquisite;
5. Studio, analisi e sviluppo delle tecniche di intelligenza artificiale per l'identificazione, la misura e la classificazione dei difetti in funzione dello specifico settore industriale;
6. Sviluppo di sistemi di automazione di un processo di controllo con liquidi penetranti.

Tecnologie e Sistemi di Produzione

Advisor:

Prof. Doriana D'Addona

Supporting information:

Cooperation with:

- Politecnico di Torino
- Università di Pisa
- Fraunhofer IWU, Germania
- Mondragon University, Spagna
- KTH Stoccolma, Svezia
- Fraunhofer IGCV, Germania
- UNED Madrid, Spagna

INTELLIGENT SENSOR MONITORING FOR SMART SUPPORT SYSTEMS TO ENHANCE MANUFACTURING PROCESS SUSTAINABILITY IN MACHINING TECHNOLOGIES

The project is focused on the development of smart sensor monitoring to configure knowledge-based support systems with the aim to enhance the sustainability of manufacturing processes with particular reference to machining technologies. Such sustainability enhancement will be attained by notable savings of high added-value material usage, through significant reduction of process induced defective parts deemed to be scrapped, and consistent cutback of consumable materials such as cutting tools and used cutting fluids which, when disposed of, determine considerable environmental pollution in terms of non-recyclable materials wastage.

Moreover, the minimisation of the use of traditional cutting fluids, either entirely based on mineral oils or in the case of water-based cutting fluids containing up to 10% mineral oils, through the development of dry cutting, minimum quantity lubrication (MQL) and bio-lubricant based processes, will greatly improve human operator safety and health protection.

Finally, the implementation of smart sensor monitoring will positively impact the process efficiency in terms of dependable automation implementation, zero defect manufacturing perspective and reduced corrective maintenance time via preventive maintenance approaches. The smart sensor monitoring systems and solutions to be developed and implemented will be applied to machining processes selected among the principal machining technologies currently employed in modern manufacturing industry. The experimental testing campaign of the selected machining processes will also reckon on the use of MQL, bio-based lubrication and dry cutting, instead of traditional cutting fluids largely based on mineral oils, to reduce environmental pollution due to used cutting fluid disposal and to prevent cutting fluid-related health hazards for human operators, such as allergic reactions, irritation of the eyes, skin dermatitis and hypersensitivity pneumonitis. As the current worldwide consumption of traditional cutting fluids is more than 2 million tons per year, this situation offers a considerable opportunity for substitution with alternative more sustainable machining processes like those based on MQL, bio-lubrication and dry cutting conditions.

The experimental application of smart sensor monitoring involves the identification of specific process variables (cutting forces, vibrations, acoustic emissions, electric motor current, power consumption) to be measured by suitable sensors organised in a multiple sensor system providing signals related to the values of the gauged physical quantities. The acquired signals will undergo analogue and digital signal conditioning and processing to extract and select functional signal features relevant for the control of the monitored process and tool conditions.

The selected signal features will be inputted to AI-based decision making paradigms, consisting of Machine Learning (ML) and Deep Learning (DL) models, for smart sensorial feature data processing to automatically provide online and real time control of machining process and diagnosis of non-conformity conditions due to material defects generation, unacceptable tool state and process parameters deviation.

The smart signal processing procedures will be carried out using Industry 4.0 Key Enabling Technologies (KETs) such as Edge Computing (using server-on-the-device approaches) or Fog/Cloud Computing (using remote server-based data processing).

The ML/DL control and diagnosis outputs will be employed, via NC system interfacing, to execute real-time adaptive/corrective actions for reliable process automation sustenance and optimal sustainable process conditions endorsement.

Tecnologie e Sistemi di Produzione

Advisor:

Prof. Antonello Astarita
Prof. Umberto Prisco

Supporting information:

Il dottorando spenderà il suo periodo all'estero presso il The Welding Institute (Cambridge) dove la tecnologia è stata brevettata nel 1991. Tale istituto lavora in stretta collaborazione con l'Università di Cambridge e quindi il dottorando dividerà il suo tempo fra TWI e l'Università di Cambridge.

STUDIO DELLA SOSTENIBILITÀ DEL PROCESSO DI FRICTION STIR WELDING PER LA GIUNZIONE DI LEGHE LEGGERE INNOVATIVE

La saldatura FSW è un processo relativamente giovane che consente di saldare metalli e polimeri anche in configurazione mista, negli ultimi anni sta trovando sempre maggiore impiego nella fabbricazione di auto, aerei e treni. Sebbene il processo sia ben consolidato per alcune leghe e per alcune configurazioni, rimangono alcune questioni aperte prima di poter estendere il processo a leghe innovative ed a configurazioni di maggiore interesse industriale. La sostenibilità del processo, inoltre, non è ancora stata studiata nel dettaglio. Appare quindi chiaro che nuova ricerca sia necessaria per sviluppare nuove soluzioni applicative.

Il programma di ricerca previsto è il seguente:

- Analisi della letteratura per individuare le leghe che potrebbero essere di maggiore interesse industriale una volta che ne sia stata sviluppata la saldabilità;
- Analisi della letteratura per individuare le configurazioni di maggiore interesse ancora non ottenibili mediante FSW;
- Studio del processo di saldatura FSW delle predette leghe nelle configurazioni di interesse, analisi della metallurgia dei materiali e del legame fra parametri di processo e proprietà del manufatto finale;
- Analisi della sostenibilità dei processi sviluppati mediante analisi LCA;
- Implementazione del processo in ambito Industry 4.0;
- Sviluppo di un modello che permetta di simulare il processo al fine di comprenderne meglio il funzionamento.