

NUMERO 5

Maggio 2024

NEWSLETTER

LA SOSTENIBILITÀ AL CENTRO! <<

IL LANCIO DEL NOSTRO CLUSTER <<

**PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO
CON AIMEN E BRAVE <<**

**NANOTECNOLOGIA IN AZIONE: COMUNICARE IL NOSTRO
PROGETTO CON CREATIVE NANO <<**

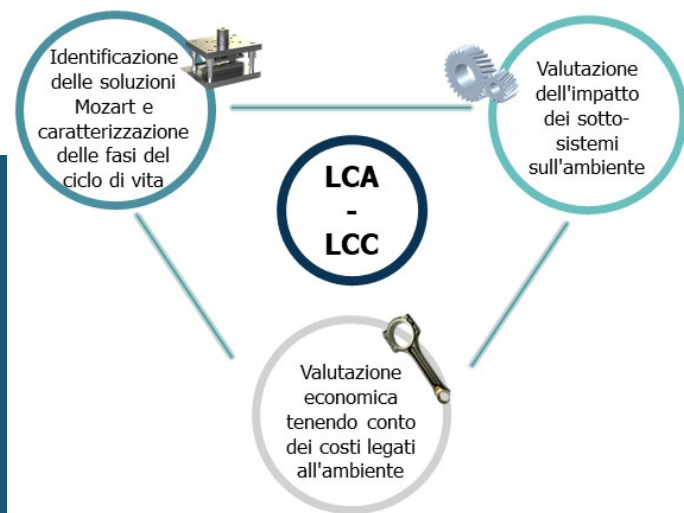


Funded by
the European Union

Finanziato dall'Unione Europea con l'Accordo di Sovvenzione Nr. 101058450. I punti di vista e le opinioni espresse sono tuttavia quelli dell'autore/degli autori e non riflettono necessariamente quelli dell'Unione Europea. Né l'Unione Europea né l'autorità concedente possono essere ritenute responsabili per essi.

1. LA SOSTENIBILITÀ AL CENTRO!

Per MOZART la sostenibilità è fondamentale e i nostri partner di NTUA stanno approfondendo la conoscenza di tutti gli aspetti delle nostre innovazioni attraverso un'analisi completa del ciclo di vita (LCA) e del costo del ciclo di vita (LCC). Perché, potreste chiedervi? Semplice! Per comprendere e migliorare ciò che offriamo!



► Rivelare lo studio

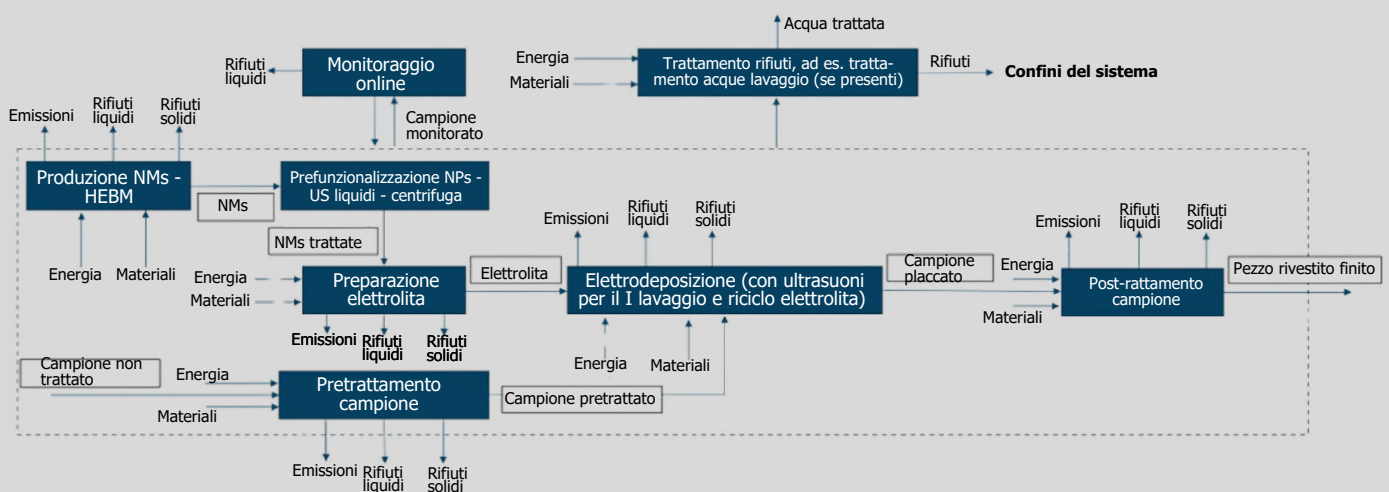
Quando esaminiamo la sostenibilità delle nostre soluzioni innovative, non tralascieremo nulla, con le analisi LCA e LCC che esaminano ogni aspetto dei nostri prodotti in tutte le fasi del loro ciclo di vita. L'obiettivo? Comprendere sia l'impatto ambientale sia i costi, scoprendo tutto, dalle spese visibili a quelle nascoste relative all'ambiente. State tranquilli, la nostra analisi rispetta i rigorosi standard stabiliti dalle ISO 14040 e 14044.



1. LA SOSTENIBILITÀ AL CENTRO!

Gettare le fondamenta

Qualsiasi studio non è valido senza fondamenta concrete. Per la LCA e la LCC, queste fondamenta risiedono nella completa comprensione dei metodi e dei processi di produzione della nostra soluzione nel suo intero ciclo di vita. NTUA ha avviato un'ampia revisione della letteratura, identificando processi e sottosistemi cruciali per i nostri prodotti. Questi confini sono creati con precisione, garantendo che i risultati rappresentino accuratamente l'intero ciclo di vita del prodotto.



Valutare l'impatto

Il nostro studio non riguarda solo i numeri, ma anche la comprensione delle implicazioni più ampie. Dopo un'attenta valutazione, NTUA ha concluso che le categorie di impatto da esaminare sono: Cambiamento Climatico, Acidificazione, Eutrofizzazione e altro, garantendo una comprensione olistica dell'impatto delle nostre soluzioni e di come possiamo migliorarlo.

Rimanete sintonizzati

Avendo gettato le basi, ora ci stiamo concentrando sui prossimi passi. Aggiornando costantemente le nostre analisi, i nostri sistemi e i nostri database, il nostro viaggio verso la sostenibilità continua. Mentre procediamo, ci impegniamo per la trasparenza e la collaborazione, assicurandoci che la nostra analisi rifletta le più moderne conoscenze e gli ultimi sviluppi. Restate sintonizzati per i nostri aggiornamenti dalla prima linea della sostenibilità.



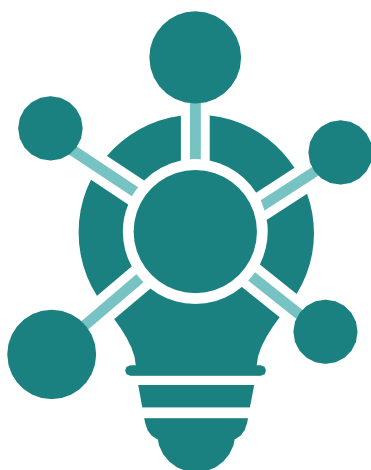
2. IL LANCIO DEL NOSTRO CLUSTER

Nel gennaio 2024, MOZART ha lanciato ufficialmente il suo Cluster!

Sono passati quattro mesi dal lancio ufficiale del cluster MOZART e abbiamo fatto passi da gigante nel nostro percorso verso soluzioni sicure e sostenibili per progettazione. A gennaio del 2024, MOZART, insieme ai suoi progetti gemelli, ha continuato a promuovere un ambiente collaborativo, esplorando potenziali sinergie e opportunità di scambio di conoscenze.

Punti salienti dei nostri progressi dal lancio:

- ♦ **Ambiente collaborativo:** il nostro team è attivamente impegnato in discussioni, brainstorming di idee creative e pianificazione di future attività congiunte con i nostri progetti gemelli.
- ♦ **Approcci innovativi:** ci siamo concentrati sullo sviluppo di approcci innovativi per affrontare le sfide comuni e migliorare la sostenibilità nei nostri rispettivi settori.
- ♦ **Risultati dei progetti gemelli:** anche i nostri progetti gemelli, FreeMe (www.freeme-project.eu), Nickeffect (<https://nickeffect.eu>) e Nouveau (www.nouveau-project.eu), hanno fatto passi da gigante nei loro argomenti di ricerca e obiettivi.



freeme



MOZART



3. PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO CON AIMEN E BRAVE

Nell'ambito del Task T3.1, sono stati raggiunti significativi progressi tecnici. Per facilitare la progettazione del bagno elettrolitico, gli sforzi si sono concentrati sulla sostituzione dell'acido borico come agente tampone con un'alternativa più sostenibile, utilizzando strumenti di Intelligenza Artificiale (AI). Nello specifico, è stato intrapreso un compito di ingegneria inversa, in cui è stato impiegato un Autoencoder Condizionale Variazionale (CVAE) per generare set di molecole che presentano proprietà simili all'acido borico. Un CVAE è una rete generativa costituita da due reti neurali. La prima, un encoder, semplifica i dati di input in uno spazio di dimensione inferiore chiamato spazio latente, in cui vengono catturate le caratteristiche più significative dei dati. Questa rappresentazione dello spazio latente viene quindi perturbata dall'aggiunta di rumore gaussiano, rendendo il processo stocastico. La seconda rete, il decoder, traduce queste rappresentazioni nella forma originale dei dati di input, vedere Figura 1. Grazie alla natura stocastica di questo processo, la rete, una volta addestrata, quando riceve un input fornisce un set di risultati con proprietà simili.

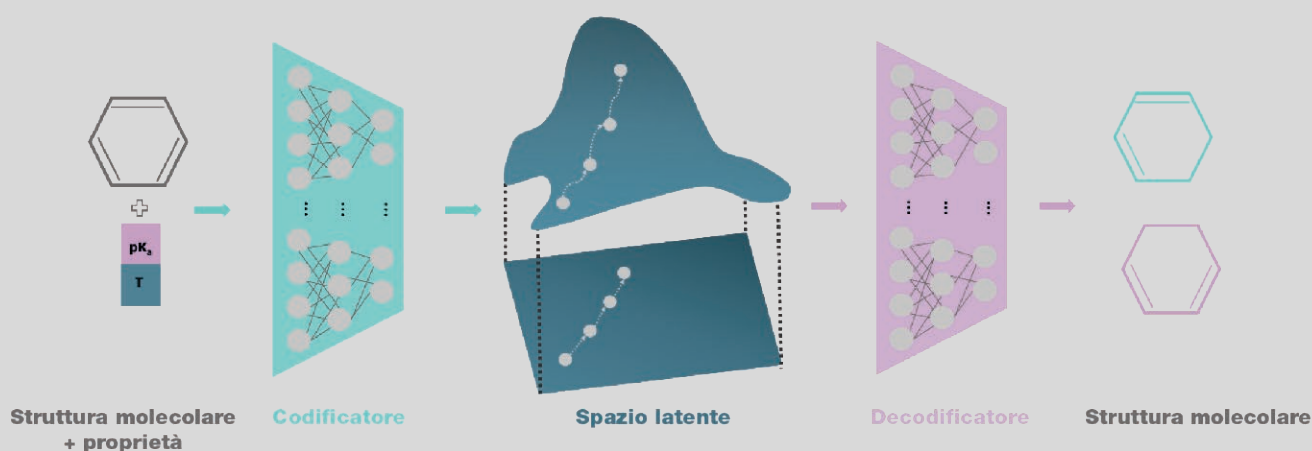


Figura 1: Struttura Autoencoder Condizionale Variazionale.

In questo caso particolare, l'Autoencoder Condizionale Variazionale (CVAE) è stato addestrato utilizzando un set di dati comprendente strutture di vari acidi rappresentate utilizzando una notazione molecolare di stringa denominata SELFReferencing embedded string (SELFIES), insieme alle loro proprietà come la costante di dissociazione acida pK_a e la temperatura a cui sono state effettuate le misurazioni. Sono stati addestrati due modelli: uno utilizzando la rappresentazione Simplified Molecular Input Line Entry System (SMILES) e l'altro utilizzando SELFIES. La rappresentazione SELFIES è stata scelta per la sua superiore robustezza rispetto a SMILES.

3. PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO CON AIMEN E BRAVE

Dopo l'addestramento, si è osservato che il modello SELFIES ha dimostrato una robustezza significativamente maggiore. In tutti i casi studiati, il modello SELFIES ha generato il 100% di molecole valide, mentre il modello SMILES ha prodotto alcune molecole non valide. Inoltre, è stato notato che la restrittività delle molecole generate variava a seconda dei parametri di input, come modifiche nella struttura molecolare e delle proprietà in relazione all'acido borico.

Inoltre, introducendo variazioni nella struttura o proprietà simili all'acido borico, la rete ha generato con successo alcuni degli acidi inizialmente proposti, come l'acido acetico, dimostrando così la validità del modello. Inoltre, il modello ha proposto altri acidi ben noti, come l'acido butirrico.

Per definire le regioni di interesse nello spazio latente per la scoperta di molecole ottimali, è stato sviluppato un algoritmo genetico. Gli algoritmi genetici imitano l'evoluzione biologica eseguendo operazioni di mutazione e crossover su individui (in questo caso molecole) attraverso le generazioni. Viene definita una funzione di fitness per misurare quanto gli individui siano ben adattati. Questa funzione viene massimizzata o minimizzata durante il processo di ottimizzazione. In base al valore di questa funzione, solo gli individui migliori possono passare alla generazione successiva, come riportato in Figura 2.

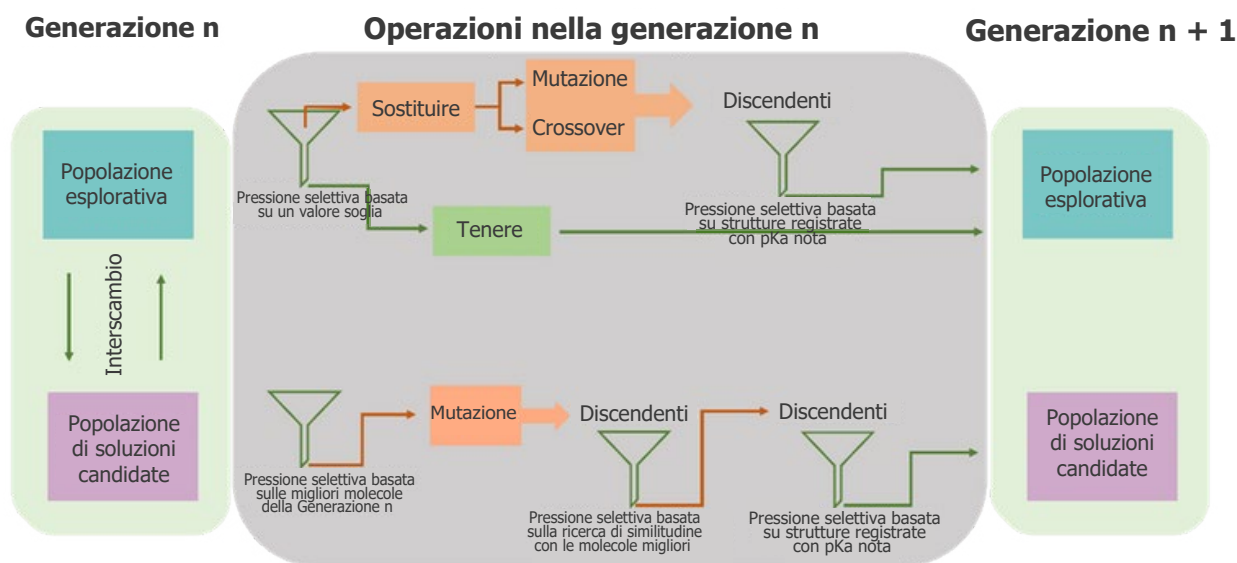


Figura 2: Panoramica generale dell'algoritmo genetico sviluppato.

3. PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO CON AIMEN E BRAVE

In questo caso, la funzione di fitness è stata definita come una combinazione di due metriche di similarità: il coefficiente di Tanimoto e la distanza euclidea nello spazio latente dell'Autoencoder Condizionale Variazionale (CVAE). Il coefficiente di Tanimoto misura la sovrapposizione tra le caratteristiche di due molecole, mentre la distanza euclidea misura la distanza nello spazio latente tra due molecole nella loro rappresentazione latente.

Per tenere conto della sostenibilità, i 14 acidi inizialmente proposti all'interno del progetto sono stati impostati come obiettivi. Per tutti questi acidi, la funzione di fitness è stata costruita calcolando la media del coefficiente di Tanimoto e della distanza euclidea dall'acido borico. Pertanto, agli individui con punteggi più alti, ciò che indica una maggiore somiglianza nel coefficiente e nella distanza dall'acido borico rispetto agli acidi target, è stata data una priorità più alta nel processo di ottimizzazione (Figura 4).

Per affrontare il problema dell'elevato costo computazionale legato alla metrica della distanza euclidea, è stato sviluppato un altro algoritmo, focalizzato esclusivamente sul coefficiente di Tanimoto (Figura 5 e Figura 6). È stato effettuato un confronto tra le prime due generazioni con entrambi gli algoritmi. Si è osservato che, sebbene entrambi gli algoritmi si siano evoluti verso la stessa regione, il primo algoritmo si è evoluto più rapidamente. Questa osservazione rafforza l'idea che entrambe le metriche siano complementari, con il coefficiente di Tanimoto che fornisce una convergenza più rapida mentre la distanza euclidea aggiunge maggiore precisione.

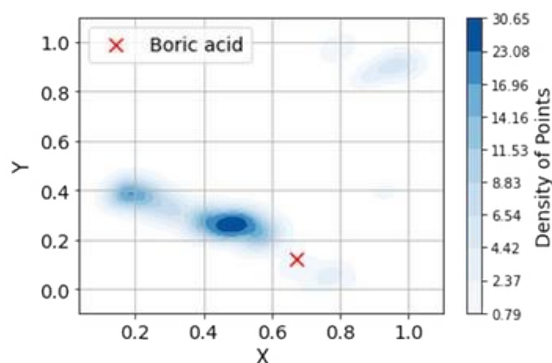


Figura 3: Generazione 1 – Algoritmo con le due metriche.

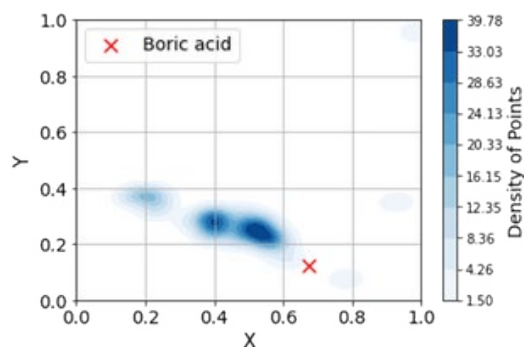


Figura 4: Generazione 2 – Algoritmo con le due metriche.

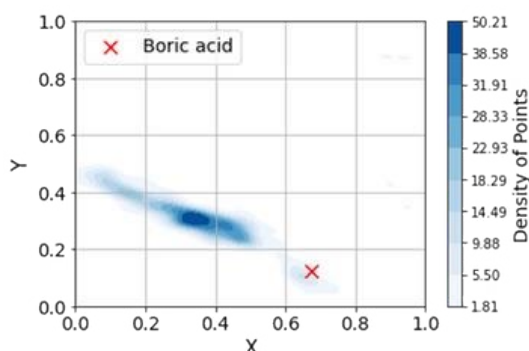


Figura 5: Generazione 1 – Con solo algoritmo di Tanimoto.

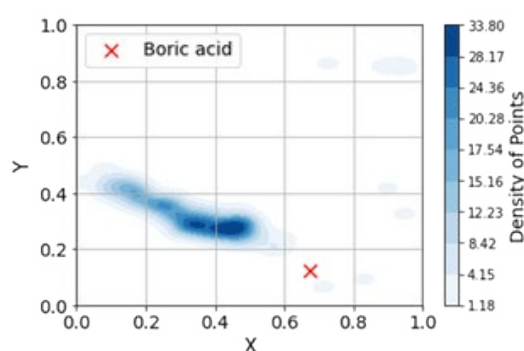
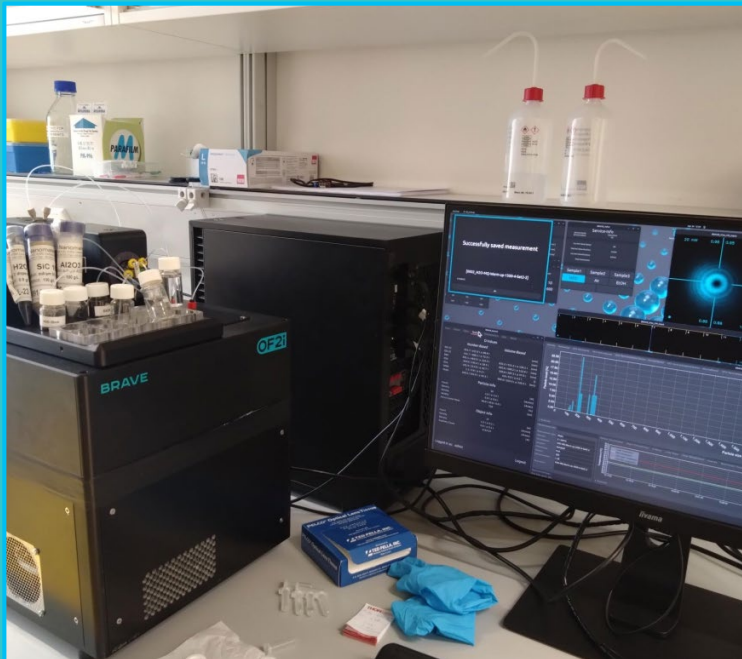


Figura 6: Generazione 2 – Con solo algoritmo di Tanimoto.

3. PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO CON AIMEN E BRAVE

In collaborazione con Aimen, BRAVE Analytics ha analizzato campioni batch utilizzando il loro innovativo dispositivo BRAVE e il metodo OptoFluidic Force Induction (OF2i). Questi dati iniziali sosterranno i nostri sforzi di modellazione, fornendo preziose informazioni per lo sviluppo del progetto.

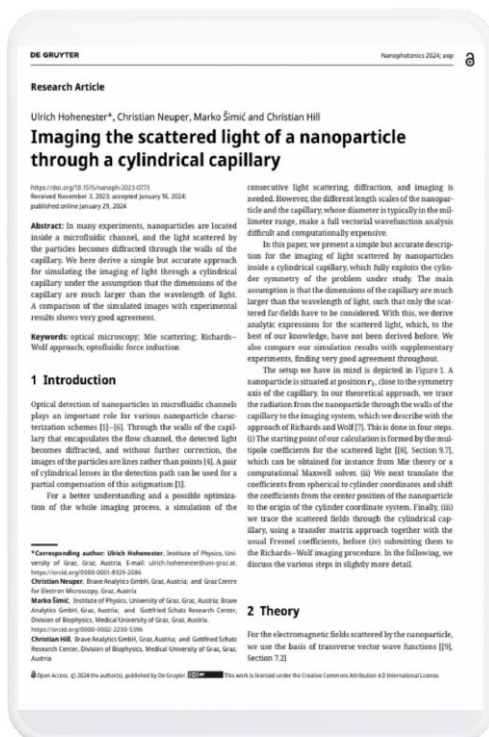


3. PROGRESSI E APPROFONDIMENTI DAL LABORATORIO CON AIMEN E BRAVE

L'Articolo di BRAVE sulla Nanofotonica: Misurare e Visualizzare con Precisione le Nanoparticelle

Tracciare la luce dagli oggetti alla telecamera è un compito impegnativo, particolarmente importante per MOZART poiché il riscontro sull'aggregazione delle particelle nel rivestimento dipende da un rilevamento estremamente preciso, che tiene conto di rifrazioni e riflessioni. Tuttavia, le sfide si presentano quando sono coinvolte interferenze d'onda, come nel dispositivo di caratterizzazione delle nanoparticelle in fase di sviluppo presso la Medical University of Graz e il suo spin-off, BRAVE Analytics. In questo dispositivo, le particelle utilizzate nell'elettrolita vengono pompate attraverso un capillare cilindrico e irradiate da un laser focalizzato; la luce diffusa risultante viene osservata con una telecamera, ciò che rivela vari modelli di interferenza a seconda dell'impostazione della messa a fuoco.

Descrivere tali fenomeni si è rivelato teoricamente scoraggiante, spingendoci a optare per un approccio "vecchia scuola" e utilizzando le funzioni analitiche riportate in un recente articolo pubblicato su Nanophotonics. In base a questo articolo, la caratterizzazione delle particelle tramite algoritmi e segnali di tracciamento della diffusione ottica di una singola particella può essere migliorata per fornire una risposta di processo ancora più precisa utile come input per il processo di modellazione e, in futuro, per rivestimenti più performanti di MOZART in generale.



Leggilo e scaricalo QUI

4. Nanotecnologia in azione: Comunicare il nostro progetto con Creative Nano



**IL PARTNER
MOZART
CREATIVE NANO
STIMOLA LE
GIOVANI MENTI**

INVESTIRE NEL FUTURO

Il nostro partner, Creative Nano, in collaborazione con la Evaggeliki Model High School di Smyrna, ha recentemente offerto un'opportunità unica a 27 talentuosi studenti delle scuole superiori, introducendoli all'affascinante mondo della ricerca e dello sviluppo.

Durante un tour completo del laboratorio durato due ore, il team di esperti scientifici di Cnano ha guidato gli studenti attraverso l'affascinante regno della nanotecnologia. Hanno mostrato i metodi e gli strumenti di caratterizzazione installati nel loro laboratorio, facendo luce sui più avanzati progressi in questo campo.

Gli studenti hanno avuto la possibilità di approfondire le applicazioni dei metodi elettrochimici e delle soluzioni tecnologiche all'avanguardia nella vita di tutti i giorni. Hanno acquisito una profonda comprensione dell'immenso potenziale di queste tecniche quando si tratta di implementare strategie SSbD nell'elettrodeposizione.

4. Nanotecnologia in azione: Comunicare il nostro progetto con Creative Nano

Creative Nano (CNano) ha entusiasmato gli studenti con intuizioni e spunti su MOZART. Un'intervista esclusiva con CNano offre ulteriori approfondimenti sul mondo della nanotecnologia.



Intervista con

Dr. KATA BERKESI

Project Manager,
Creative Nano

1. Potresti descrivere brevemente il ruolo le responsabilità di Cnano e all'interno del Progetto MOZART? Vogliamo garantire una chiara comprensione dei compiti e delle aspettative di ogni partner.

Il coinvolgimento di Cnano nel progetto MOZART svolge un ruolo cruciale nelle fasi di sviluppo e dimostrazione di una nuova tecnologia Safe and Sustainable by Design (SSbD), che si concentra sulla sostituzione di rivestimenti metallici contenenti o prodotte con sostanze pericolose come il cromo duro (HC).

Obiettivo principale della nuova tecnologia SSbD è individuare uno o più rivestimenti alternativi a base di nano-compositi a matrice metallica preparati tramite deposizione elettrochimica e conformi al REACH, con proprietà meccaniche e tribologiche paragonabili o addirittura superiori a quelle dei rivestimenti in cromo duro.

Questi rivestimenti nanocompositi a matrice metallica rappresentano opzioni promettenti come robusti rivestimenti protettivi da proporre alle industrie che richiedono elevate prestazioni in termini di resistenza all'usura e alla corrosione, come quelle automobilistica e aerospaziale. In Cnano la fase dimostrativa della tecnologia SSbD è impostata per raggiungere il livello di maturità tecnologica (TRL) 5 entro la fine del progetto, raggiungendo una produzione su scala pilota con un dimostratore in ambito reale/industriale.

2. Nel vostro laboratorio, quali sono alcuni dei risultati significativi relativi al progetto MOZART di cui siete particolarmente orgogliosi? Condividi eventuali innovazioni, scoperte o traguardi che pensi potrebbero essere utili per la newsletter.

Nel laboratorio di Cnano sono stati raggiunti diversi traguardi significativi nella preparazione del rivestimento, grazie alle infrastrutture interne che consentono esperimenti che vanno dalla scala di laboratorio alla piccola scala e fino alla scala pilota. Tali infrastrutture sono integrate con sofisticate tecniche di caratterizzazione, che forniscono preziose informazioni sulle proprietà meccaniche, morfologiche, strutturali e sulla composizione.

Cnano ha sviluppato con successo un nuovo elettrolita nanocomposito-ceramico che consente la deposizione di rivestimenti a matrice metallo-ceramica con microdurezza Vickers superiore a 1000 HV. Questo risultato è stato raggiunto utilizzando un elettrolita organico acido a base di Ni conforme al REACH.

Partendo da questo elettrolita base, Cnano ha perseguito un ulteriore sviluppo, incorporando nanoparticelle 2D al posto delle particelle ceramiche. Questa innovazione ha portato alla deposizione su scala di laboratorio di rivestimenti dalle eccezionali proprietà tribologiche, con un coefficiente di attrito (CoF) inferiore a 0,16.

4. Nanotecnologia in azione: Comunicare il nostro progetto con Creative Nano



3. Dal momento che di recente hai interagito con i ragazzi delle scuole, vorresti condividere le tue esperienze e alcune delle domande che ti hanno posto riguardo al progetto?

La visita degli studenti si è rivelata estremamente utile per quanto riguarda la presentazione delle tecniche di elettrodeposizione. Hanno espresso particolare interesse per l'applicazione pratica dei rivestimenti preparati, la capacità delle vasche di placcatura e gli aspetti di sicurezza e sostenibilità di queste tecniche. Gli studenti sono rimasti colpiti dal processo di scalabilità in laboratorio e dalla capacità di Cnano di ricevere un riscontro tempestivo sui rivestimenti grazie ai metodi analitici disponibili in loco.



4. Mentre MOZART sta progredendo, potresti raccontarci quali sono le sfide, gli obiettivi o i traguardi che vorresti vedere nei prossimi mesi?

Nei prossimi mesi, attraverso una stretta collaborazione con i partner, che forniranno preziose indicazioni sulla sicurezza e sostenibilità dei rivestimenti preparati su scala di laboratorio presso Cnano, sarà finalizzata la composizione del bagno per entrambe le formulazioni a base di Ni/ceramica e Ni/2D rispettivamente, aprendo la strada al passaggio su piccola scala.

Per la prossima fase di sviluppo le aspettative sono alte!



USO DI RIVESTIMENTI NANO-COMPOSITI A MATRICE METALLICA COME ALTERNATIVA AL CROMO DURO



Segui il
progetto sui
social media



MOZART

Coordinatore del Progetto
PoliMi

Politecnico di Milano

Piazza Leonardo da Vinci, 32
20133 Milano



info@mozart-project.eu

www.mozart-project.eu



Funded by
the European Union

Finanziato dall'Unione Europea con l'Accordo di Sovvenzione Nr. 101058450. I punti di vista e le opinioni espresse sono tuttavia quelli dell'autore/degli autori e non riflettono necessariamente quelli dell'Unione Europea. Né l'Unione Europea né l'autorità concedente possono essere ritenute responsabili per essi.

