PROGRAMMA PRIN 2022 - BANDO PRIN 2022 Decreto Direttoriale n. 102 del 02-02-2022

TITOLO DEL PROGETTO: Innovative Mathematical Models For Soft Matter And Hierarchical Materials - 2022XLBLRX

CODICE CUP: E53D23018000001

Budget DIST: 32.620,00 €

Responsabile Unità Locale: Prof. Arsenio Cutolo

Altre Unità di Ricerca coinvolte nel progetto: Politecnico di Bari; Università Roma Tre; Università di Trento

Descrizione del progetto

Il progetto si propone di sviluppare modelli predittivi per materiali soffici e gerarchici partendo dai loro meccanismi interni su scala microscopica. Le attività sono articolate in quattro linee di ricerca integrate, ciascuna affidata a un'Unità di Ricerca con competenze specifiche. L'Unità 1, con sede a Bari, ricopre un ruolo teorico centrale integrando meccanica statistica, meccanica del continuo non lineare, termodinamica e modellazione costitutiva multiscala. L'Unità 2 di Roma Tre si concentra sulla meccanica della morfogenesi, sui cambiamenti di forma indotti da solventi come l'essiccazione e il rigonfiamento, nonché sul trasporto e sulle simulazioni numeriche. L'Unità 3 di Trento studia le instabilità quali ondulazione e piegatura di materiali soffici su substrati, oltre alla meccanica di membrane e interfacce biologiche. L'Unità 4, che coordina il pacchetto di lavoro D, si occupa invece di meccanocellula e meccanobiologia sperimentale, con particolare attenzione alla risposta cellulare agli stimoli meccanici, fenomeno noto come meccanotropismo, e alla caratterizzazione meccanica delle singole cellule.

Finalità

L'obiettivo generale del progetto è comprendere come costruire modelli efficaci per materiali soffici e gerarchici a partire dai meccanismi interni su piccola scala, collegando i diversi livelli di descrizione, da quello molecolare a quello macroscopico, senza trascurare forze reali come energia, entropia, confini e interfacce. Il progetto mira inoltre a sviluppare strumenti predittivi, sia teorici che computazionali e sperimentali, per materiali bio-ispirati e applicazioni biomediche.

Più nello specifico, l'Unità 1 ha lo scopo di fornire l'impalcatura concettuale e metodologica per l'intero progetto, unificando teoria e applicazioni. L'Unità 2 intende spiegare come processi quali essiccazione, disidratazione, diffusione e rigonfiamento inneschino cambiamenti di forma e instabilità in materiali compositi. L'Unità 3 si propone di quantificare l'ondulazione e la piegatura in strati anisotropi e di modellare interfacce biologiche come le membrane lipidiche con approcci chemio-meccanici. L'Unità 4, infine, punta a studiare il meccanotropismo, ovvero il riorientamento cellulare indotto da stimoli

meccanici, e a caratterizzare le proprietà meccaniche delle singole cellule in termini di rigidezza, adesione e pre-stress.

Risultati attesi

I risultati attesi puntavano ad un quadro scientifico comune e coerente capace di integrare i diversi approcci delle unità, portando a modelli predittivi, chiari e interpretabili per materiali complessi, basati sulla combinazione di meccanica statistica, modelli del continuo e strumenti data-driven, tutto questo anche attraverso la realizzazione di strumenti sperimentali avanzati per testare gli effetti di temperatura e umidità su materiali soffici.

Risultati raggiunti

Al termine del progetto sono stati conseguiti risultati significativi a livello generale e specifico. L'Unità 1 ha effettivamente fornito la spina dorsale metodologica dell'intero progetto, assicurando che tutto il lavoro applicativo rientrasse in un quadro scientifico comune. Si è realizzata un'integrazione profonda tra le unità: l'Unità 1 ha collaborato strettamente con l'Unità 2 sulle deformazioni da umidità e con le Unità 3 e 4 su instabilità e adesione; l'Unità 2 ha lavorato con le Unità 3 e 4 su morfing e instabilità; infine, le Unità 3 e 4 hanno sviluppato una collaborazione superiore alle aspettative su membrane e meccanica cellulare. È stata inoltre resa operativa una macchina per test biassiali con camera climatica in grado di operare tra 0 e 70 gradi centigradi con un'umidità controllabile fino al 95 percento, nonostante le notevoli difficoltà tecniche incontrate.

Passando ai risultati specifici, l'Unità 1 ha pubblicato uno studio sui limiti continuo-termodinamici nella meccanica statistica e ha analizzato sull rivista *Entropy* l'effetto del rumore termico su transizioni di fase con interazioni a lungo raggio. Ha esteso queste analisi alla nucleazione e propagazione di cricche in presenza di attivazione termica e a modelli adesivi continui con fluttuazioni. Ha modellato la supercontrazione della seta di ragno come una transizione di fase indotta dall'umidità sul *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* e ha utilizzato l'apprendimento automatico non come "scatola nera" ma come strumento per costruire un modello analitico di questo processo su *Advanced Functional Materials*. Ha infine studiato fibre artificiali bagnate e l'effetto della temperatura sulla loro risposta meccanica.

L'Unità 2 ha condotto studi sui cambi di forma programmabile in alimenti durante l'essiccazione, sulle instabilità in strutture core-shell e sullo sviluppo di pori durante l'essiccazione. Ha pubblicato il libro *Mechanics of Swelling* e ha ricercato gel biopolimerici auto-contrattili, il rimodellamento in strati e la crescita guidata da stimoli sia meccanici che non meccanici. Ha studiato origami con pieghe curve e travi auto-oscillanti a cristalli liquidi in acqua sotto illuminazione, e ha sviluppato una strategia innovativa per addestrare in modo più efficiente le reti neurali informate dalla fisica, concentrando il calcolo nelle regioni critiche.

L'Unità 3 ha prodotto due pubblicazioni su leggi di scala per l'ondulazione di bilayer rinforzati con fibre, rispettivamente sul *Journal of Applied Physics* e sul *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Ha pubblicato diversi articoli sulle instabilità di monostrati lipidici compressi, incluso un lavoro su *PNAS*, e ha sviluppato modelli chemio-meccanici per la formazione di zattere lipidiche e per l'effetto della viscosità di membrana. Ha studiato l'innesco asimmetrico di cricche e l'effetto della microstruttura nel peeling, e ha

infine realizzato un modello poroelastico anisotropo della lamina cribrosa e gemelli digitali per lo studio del glaucoma.

Infine, l'Unità 4 ha realizzato un setup sperimentale completo comprendente un incubatore personalizzato, un dispositivo stampato in 3D per applicare carichi puntuali e un microscopio Axio Zoom V16 Zeiss, con acquisizione di immagini ogni quindici minuti per ventiquattro ore su cellule epiteliali. Ha automatizzato in Python algoritmi di segmentazione dei confini cellulari basati su tecniche di deep learning e algoritmi di rilevamento dell'orientamento basati sul tensore di struttura. Ha sviluppato un modello meccanico della cellula aderente come struttura tensegrity a forma di V con elementi iperelastici, validandolo sperimentalmente mediante microscopia a forza atomica che ha permesso di mappare rigidezza, modulo di Young ed energia di adesione, supportata da microscopia elettronica e a fluorescenza per visualizzare il citoscheletro. È stata infine ottenuta una correlazione quantitativa positiva tra i risultati sperimentali e le previsioni del modello teorico.