

## ABSTRACT

Marrafino, Francesco, *Application of Artificial Neural Networks to the design and optimization of superhydrophobic coatings*, Ph.D. program in Drug Discovery and Development, 2021, University of Salerno.

Recentemente, una considerevole attenzione è stata dedicata allo sviluppo di superfici superidrofobiche a causa delle loro vantaggiose proprietà antimicrobiche e autopulenti. Mentre uno sforzo significativo è stato dedicato alla loro realizzazione, pochissime superfici polimeriche superidrofobiche possono essere considerate durevoli contro le sollecitazioni imposte dall'esterno. Questo lavoro si concentra sullo sviluppo di un rivestimento con forti proprietà superidrofobiche e resistenza all'abrasione, utilizzando un processo di preparazione semplice e scalabile. Le nanoparticelle di silice idrofobica pirogenica sono state utilizzate per conferire proprietà superidrofobiche ai rivestimenti. 450 campioni sono stati preparati usando un approccio layer-by-layer, depositando uno strato di resina epossidica o PDMS come adesivo su un substrato (PC/ABS), seguito da uno o più strati di nanoparticelle di silice o strati misti di silice-resina. Il rivestimento con le migliori proprietà mostra un angolo di contatto di  $157^\circ$  e una resistenza di grado tape-peeling. Il metodo di preparazione sviluppato prevede la deposizione a spruzzo di un rivestimento multistrato composto da quattro strati. Gli strati 1-3 sono 1) nanoparticelle di silice, 2) resina epossidica e 3) nanoparticelle di silice, seguiti da una parziale polimerizzazione del rivestimento (15 minuti,  $70^\circ\text{C}$ ); un altro strato di silice viene poi spruzzato sulla superficie e viene polimerizzato per 10 minuti. Nella seconda parte del lavoro, l'attenzione si sposta sull'ottimizzazione del processo di rivestimento e di preparazione utilizzando le reti neurali artificiali. Dato l'alto numero di parametri coinvolti, l'ottimizzazione del processo è un'operazione complessa. Le Reti Neurali Artificiali sono lo strumento migliore per affrontare problemi di analisi multivariata. Per questo motivo, i dati di tutti i campioni preparati sono stati raccolti in un dataset utilizzato per addestrare una rete neurale in grado di prevedere il grado di idrofobicità e la resistenza all'abrasione di un rivestimento a base di nanoparticelle di silice. Gli algoritmi sono stati utilizzati per preparare un rivestimento ottimizzato con un angolo di contatto  $>160^\circ$  e un alto grado di resistenza all'abrasione, attualmente in fase di valutazione brevettuale per una potenziale applicazione in superfici antibatteriche. Infine, l'applicazione delle reti neurali artificiali per sviluppare due strumenti predittivi bioinformatici sarà discussa molto brevemente.

**KEYWORDS:** Superhydrophobic, Artificial Neural Network, Antimicrobial, Antifouling, Self-cleaning, Surfaces.