

IA e scienza dei materiali: rivoluzione per il futuro del settore energetico

L'IA si sta affermando come strumento chiave per accelerare la scoperta di materiali energetici. Grazie agli algoritmi di apprendimento automatico, è possibile individuare schemi nei dati e prevedere rapidamente risultati che, altrimenti, richiederebbero centinaia di ore di simulazioni quantistiche. L'IA ha già dimostrato il suo valore identificando materiali innovativi per batterie, celle fotovoltaiche organiche, catalizzatori per la conversione della CO₂ e diodi organici a emissione di luce (OLED).

DOI 10.12910/EAI2025-013

di Massimo Celino, Giovanni Ponti, Dipartimento tecnologie energetiche e fonti rinnovabili Divisione per lo Sviluppo di Sistemi per l'Informatica e l'ICT - ENEA

I crescente fabbisogno di energia sostenibile è una delle sfide più pressanti del nostro tempo. Governi e aziende di tutto il mondo stanno investendo in tecnologie innovative per la raccolta, la conversione e l'immagazzinamento dell'energia. Tuttavia, le tecnologie attuali, come le celle solari al silicio, stanno raggiungendo il loro limite di efficienza, spingendo i ricercatori a esplorare alternative promettenti come le perovskiti e i quantum dots. Questi materiali offrono non solo migliori prestazioni, ma anche una maggiore sostenibilità. Allo stesso tempo, le batterie, fondamentali per immagazzinare energia rinnovabile, devono diventare più economiche, efficienti e durature, privilegiando l'uso di materiali abbondanti e sicuri, evitando elementi costosi e rari come il piombo, il platino e l'oro. **Un altro aspetto cruciale è l'analisi del ciclo di vita dei materiali, che deve dimostrare un impatto positivo nella riduzione dell'impronta di carbonio, contribuendo alla sfida globale di un futuro energetico sostenibile.**

La scoperta di nuovi materiali è spes-

so ostacolata dall'enorme quantità di dati sperimentali generati. Solo negli Stati Uniti, il National Institute of Standards and Technology (NIST) gestisce 65 database con decine di migliaia di misurazioni. Dal 2010, sono stati pubblicati oltre 1,7 milioni di articoli scientifici su batterie e celle solari. Tuttavia, comprendere e razionalizzare la relazione tra la struttura atomica di un materiale e le sue proprietà macroscopiche è ancora una sfida estremamente complessa.

Pregiudizi umani e limiti tecnologici

Purtroppo, molti materiali vengono scoperti attraverso approcci empirici, un processo lento e costoso che prevede il test manuale di pochi campioni alla volta, spesso influenzato da pregiudizi umani e limiti tecnologici. Per superare queste limitazioni, stanno emergendo strumenti computazionali in grado di generare automaticamente strutture atomiche e calcolarne le proprietà chimico-fisiche, incluse quelle elettroniche. Piattaforme come **Materials Project** [Jain] utilizzano supercomputer

per prevedere le proprietà di oltre 700.000 materiali, offrendo un enorme potenziale industriale. Analogamente, il **Laboratorio NOMAD** [Draxl] raccoglie e organizza dati generati da simulazioni computazionali di tutto il mondo, fornendo strumenti di Intelligenza Artificiale (AI) per identificare materiali nuovi con prestazioni aumentate. Queste iniziative trasformano grandi volumi di dati in soluzioni pratiche, aprendo la strada a tecnologie innovative.

L'IA si sta affermando come strumento chiave per accelerare la scoperta di materiali energetici. Grazie agli algoritmi di apprendimento automatico, è possibile individuare schemi nei dati e prevedere rapidamente risultati che, altrimenti, richiederebbero centinaia di ore di simulazioni quantistiche. L'IA ha già dimostrato il suo valore identificando materiali innovativi per batterie, celle fotovoltaiche organiche, catalizzatori per la conversione della CO₂ e diodi organici a emissione di luce (OLED).

Tuttavia, esistono ancora sfide significative. Una di queste è la mancanza di una rappresentazione universale

per codificare i materiali dalla scala atomica a quella macroscopica. Ogni applicazione richiede proprietà specifiche come composizione chimica, struttura cristallina e conduttività, ma i dati sperimentali di qualità sono rari. Inoltre, i modelli computazionali spesso si basano su ipotesi e schemi teorici che non sempre riflettono accuratamente la complessità delle condizioni reali.

Per affrontare queste difficoltà, è essenziale una stretta collaborazione tra le comunità dell'IA e della scienza dei materiali. Questa sinergia può favorire una comprensione reciproca delle esigenze e delle capacità, creando un ecosistema più efficiente per l'innovazione. Negli ultimi anni, iniziative multidisciplinari hanno promosso questa collaborazione. Tra le più rilevanti troviamo la **Materials Genome Initiative** negli Stati Uniti, il **Centre for Accelerated Materials Discovery and Innovation** in Canada [Advanced] e il progetto **BIG-MAP** in Europa [Kraus]. Una delle iniziative più promettenti è l'iniziativa COST **EU-MACE**, che mira a creare un ecosistema integrato europeo per lo sviluppo accelerato dei materiali energetici [CA22123]. Questo progetto combina competenze digitali e materiali avanzati, promuovendo la condivisione di risorse, labo-

ratori e conoscenze per un progresso coordinato delle **Materials Acceleration Platforms (MAPs)**.

Verso un quinto paradigma principale

La scienza ha attraversato quattro paradigmi principali: dalla scienza sperimentale alla teoria matematica, dal calcolo numerico alla scoperta basata su grandi volumi di dati. Oggi, con il calcolo computazionale e l'IA, stiamo entrando nel quinto paradigma, un'era in cui la scoperta scientifica è guidata dall'elaborazione avanzata dei dati e dalla modellizzazione predittiva. Un esempio pionieristico è **MatterSim** [Yang], un modello di IA capace di stimare con precisione le proprietà dei materiali su un ampio spettro di elementi, temperature e pressioni, superando le limitazioni delle simulazioni quantistiche e degli esperimenti tradizionali.

Un altro strumento all'avanguardia è **MatterGen** [Zeni], uno strumento di intelligenza artificiale generativa che non si limita a categorizzare i materiali esistenti, ma crea nuovi materiali basati sui requisiti specifici di un'applicazione. L'idea è stata di applicare i modelli di IA generativa, utilizzati per generare nuove immagini o testi, per assemblare nuove strutture atomiche

dietro richiesta di adeguati prompt. Questo approccio consente di esplorare uno spazio di progettazione enormemente più ampio in un tempo incredibilmente ridotto, superando le limitazioni di tempi e costi degli approcci tradizionali. Se questo approccio confermerà le potenzialità che promette, si potrà realizzare il sogno di ogni ricercatore: costruire il materiale desiderato come se fosse una composizione di mattoncini Lego.

Anche l'Italia partecipa a questa rivoluzione grazie ad alcune iniziative significative, tra cui è possibile ricordare il Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data e Quantum Computing realizzato e gestito dalla Fondazione ICSC. ICSC è uno dei cinque Centri Nazionali istituiti dal PNRR, il cui Spoke7 "Materials and Molecular Science" punta ad ampliare lo spettro delle applicazioni scientifiche ed industriali dei codici numerici per la simulazione dei materiali, sfruttando le imponenti risorse di calcolo ora disponibili in Italia e in Europa. **ENEA partecipa al Centro Nazionale HPC e coordina lo sviluppo della piattaforma IEMAP (Italian Energy Materials Acceleration Platform), realizzata in collaborazione con CNR, IIT e RSE.**

La piattaforma IEMAP

Il progetto, finanziato dal Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica nell'ambito dell'iniziativa di cooperazione internazionale "Mission Innovation", ha sviluppato **la piattaforma IEMAP che utilizza il supercalcolo e l'intelligenza artificiale per accelerare e guidare la progettazione di materiali innovativi per le applicazioni nei settori del fotovoltaico, delle batterie e degli elettrolizzatori.** IEMAP rappresenta quindi un esempio di come la tecnologia possa trasformare la ricerca sui materiali, riducendo drasticamente i tempi necessari per portare un nuovo



materiale dal laboratorio all'applicazione pratica. Il cuore di IEMAP è una rete di laboratori dal nord al sud di Italia che generano dati reali e simulati per un database centralizzato (<https://iemap.enea.it>). Il calcolo ad alte prestazioni rende possibile sviluppare ed utilizzare modelli di IA per identificare rapidamente i materiali più promettenti. Grazie alla condivisione dei dati e delle competenze tra i laboratori partecipanti, il progetto offre alle aziende strumenti per una

prototipizzazione rapida ed efficiente [Ronchetti]. **La scoperta e la progettazione di nuovi materiali rappresentano una delle sfide più importanti per affrontare le esigenze energetiche del futuro.** Le tecnologie basate sull'intelligenza artificiale, sul calcolo computazionale e sulla collaborazione multidisciplinare stanno trasformando il modo in cui i materiali vengono progettati, testati e applicati. Iniziative come IEMAP, EU-MACE e i progetti internazionali di accelerazio-

ne dei materiali offrono un modello di innovazione che combina efficienza, sostenibilità e progresso tecnologico. **Questa rivoluzione scientifica non solo promette di rendere le tecnologie energetiche più accessibili e sostenibili, ma getta anche le basi per un futuro in cui la scoperta scientifica sarà guidata da una sinergia senza precedenti tra dati, supercalcolo e intelligenza artificiale esaltando il potenziale creativo e di innovazione della mente umana.**

per info: massimo.celino@enea.it

Bibliografia

Advanced materials research facility. <https://nrc.canada.ca/en/research-development/nrc-facilities/advanced-materials-research-facility>.

CA22123 – COST Action “European Materials Acceleration Center for Energy” (EU-MACE). <https://www.cost.eu/actions/CA22123/>

De Luna P, Wei J, Bengio Y, Aspuru-Guzik A, Sargent E. Use machine learning to find energy materials. *Nature*, 552, 2017.

Draxl C, Scheffler M. The NOMAD Laboratory: From Data Sharing to Artificial Intelligence. *J. Phys. Mater.* 2, 036001(2019). DOI 10.1088/2515-7639/ab13bb

Jain A, Ping Ong S, Hautier G, Chen W, Davidson Richards W, Dacek S, Cholia S, Gunter D, Skinner D, Ceder G, Persson K A. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Mater.* 1, 011002(2013). <https://doi.org/10.1063/1.4812323>

Kraus P, Bainglass E, Ramirez F, Svaluto-Ferro E, Ercole L, Kunz B, Huber S, Plainpan N, Marzari N, Battaglia C, Pizzi G. A bridge between trust and control: computational workflows meet automated battery cycling. *J. Mater. Chem. A*, 2024,12, 10773-10783. <https://doi.org/10.1039/D3TA06889G>

Ronchetti C, Marchio S, Buonocore F, Giusepponi S, Ferlito S, Celino M. Study of Cathode Materials for Na-Ion Batteries: Comparison Between Machine Learning Predictions and Density Functional Theory Calculations. *Batteries* 2024, 10, 431. <https://doi.org/10.3390/batteries10120431>

Marzari N. et al. Materials Cloud, a platform for open computational science. *Scientific Data* | (2020) 7:299 | <https://doi.org/10.1038/s41597-020-00637-5>.

Yang H et al. MatterSim: A Deep Learning Atomistic Model Across Elements, Temperatures and Pressures. *arXiv:2405.04967*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>

Zeni, C., Pinsler, R., Zügner, D. et al. A generative model for inorganic materials design. *Nature* (2025). <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>