

Artificial Intelligence for Material Science

Relatore: Dott. Giuseppe Fisicaro

Consiglio Nazionale delle Ricerche – Istituto per la Microelettronica e Microsistemi (CNR-IMM)
Z.I. VIII Strada 5, 95121 Catania, Italy

Data: 20 Marzo 2026 – ore 09:00

Luogo: Aula Di3A-1P, Via Valdisavoia 5, Catania

Abstract

L'Intelligenza Artificiale sta ridefinendo il modo in cui la scienza concepisce la materia: non più soltanto uno strumento di calcolo, ma un acceleratore di scoperta capace di integrare teoria, simulazione ed esperimento in un unico paradigma scientifico. Nel contesto della scienza dei materiali, l'AI supera la tradizionale separazione tra modellistica e laboratorio. I Machine Learning Interatomic Potentials (MLIPs) raggiungono accuratissime quantomeccaniche con costi computazionali compatibili con studi su larga scala, offrendo nuove opportunità per interpretare risultati sperimentali e guidare la progettazione razionale di materiali funzionali. Questa integrazione è particolarmente strategica in ambiti emergenti quali bio-sensori avanzati, interfacce bio-elettroniche e piattaforme diagnostiche di nuova generazione, dove la comprensione fine delle interazioni atomiche e molecolari diventa decisiva per orientare lo sviluppo sperimentale. Simulazione e laboratorio diventano così parti di un ciclo iterativo e sinergico di progettazione, validazione e ottimizzazione. Parallelamente, verrà presentato LARA-HPC, un sistema agentico basato su Large Language Models che traduce richieste scientifiche in workflow computazionali verificati, riducendo la barriera tecnica di accesso alle infrastrutture HPC e favorendo l'integrazione tra fisica, chimica, ingegneria e scienze della vita. Nel quadro della moderna Material Science, le applicazioni spaziano dalla chimica verde e sostenibile alla realizzazione di dispositivi intelligenti per il monitoraggio biologico e ambientale, dimostrando come la progettazione razionale dei materiali rappresenti il fulcro dell'innovazione tecnologica contemporanea. Il seminario propone dunque una riflessione sul futuro della ricerca: un futuro in cui intelligenza artificiale, sperimentazione e sostenibilità convergono per ridefinire il ruolo dello scienziato nell'era digitale.