

ATOMI, ELETTRONI E I.A.: IL FUTURO DEI MATERIALI

Prof. Cesare Franchini

Dipartimento di Fisica e Astronomia “A. Righi” - Università di Bologna

L'equazione di Schrödinger governa il comportamento dei sistemi quantistici a molti corpi, mettendo in relazione la struttura atomica con le proprietà della materia condensata. La sua soluzione numerica assistita dai computer consente la progettazione e l'ottimizzazione di tecnologie moderne, dall'elettronica a semiconduttore ai sistemi per le energie rinnovabili, dalle batterie ai materiali magnetici. In questo flash talk, discuteremo di come l'integrazione di algoritmi di apprendimento automatico nei metodi computazionali *ab initio* stia rivoluzionando la scienza dei materiali, migliorandone l'efficienza, la precisione e le capacità di scoperta.

L'I.A. PER OSSERVARE IL COMPORTAMENTO DEI MATERIALI IN TEMPO REALE

Prof.ssa Maria Clelia Righi

Dipartimento di Fisica e Astronomia “A. Righi” - Università di Bologna

Il comportamento dei materiali — dalla resistenza meccanica alla reattività chimica — è determinato da processi che avvengono alla scala atomica. Comprendere questi meccanismi è essenziale per sviluppare tecnologie più efficienti, ma osservarli in tempo reale è estremamente complesso. Le simulazioni di dinamica molecolare, soprattutto quelle basate sulla meccanica quantistica, permettono di descrivere accuratamente la formazione e la rottura dei legami chimici, ma il loro elevato costo computazionale ne ha a lungo limitato l'applicazione. L'avvento del machine learning ha rivoluzionato il campo, consentendo di estendere di ordini di grandezza le scale spaziali e temporali mantenendo l'accuratezza quantomeccanica. Questo approccio apre la strada a nuove indagini integrate con esperimenti per progettare materiali più efficienti e sostenibili. Nel seminario verranno illustrati i fondamenti della dinamica molecolare con potenziali machine learning e alcune applicazioni, come la progettazione di materiali per ridurre l'attrito e di catalizzatori per la produzione di idrogeno.

QUANDO LA CHIMICA DIVENTA UNA LINGUA: L'I.A. ALLA SCOPERTA DI NUOVE MOLECOLE

Prof. Ivan Rivalta

Dipartimento di Chimica Industriale "Toso Montanari"

Che la Chimica abbia un suo alfabeto lo sappiamo da tempo: le lettere sono gli elementi della Tavola Periodica. Oggi, però, possiamo spingerci oltre: descrivere molecole e reazioni come vere e proprie parole e frasi, cioè usare una lingua. In questo breve intervento scopriremo come l'Intelligenza Artificiale, e in particolare i modelli linguistici di grandi dimensioni (Large Language Models), possano imparare la grammatica della Chimica e persino suggerire nuove strutture molecolari, aprendo la strada alla scoperta di nuove sostanze, dai farmaci ai materiali del futuro.