Finanziato dall'Unione europea NextGenerationEU
Ministero dell'Università e della Ricerca
Italiadomani PIANO NAZIONALE DI RIPRESA E RESILIENZA
ICSC Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data and Quantum Computing

REPORT

MANIFATTURA

OS
Osservatorio sulle tendenze e le applicazioni del Supercalcolo

Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data and Quantum Computing

Osserv-azioni su...

NUOVI MATERIALI

Tendenze e applicazioni del Supercalcolo, Big Data e Quantum Computing

Settembre 2024

Indice

Indice 2
Introduzione 3
Lo stato dell'arte 4
AI e HPC nel campo dei nuovi materiali 7
GenAI nel campo dei nuovi materiali 8
Nuovi materiali e supercalcolo: quali casi d'uso? 10
FLAMIN-GO: From pathobioLogy to synoviA on chip: driving rheuMatoId arthritis to the precisioN medicine GOal 11
Democratizing quantum simulations: Materys platform makes cutting-edge science accessible 12
MaX - Materials Design at the exascale 13
Recycling and Repurposing of Plastic Waste for Advanced 3D Printing Applications 14
Nuovi Materiali nel Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data e Quantum Computing 17
La transizione energetica passa attraverso i materiali green: il progetto EET 18
Verso nuovi materiali per le batterie: il progetto ELIO 19
Utilizzare il grafene per ridurre l'attrito nelle componenti dei veicoli: il progetto ASD 20
Produrre plastica sostenibile a partire dai residui dell'industria agricola: il progetto AWAD 21
Supercalcolo per imballaggi sostenibili: il progetto PISA 22
Inventare i packaging del futuro con simulazioni multiscala: il progetto SFFP 23
Calcolo quantistico e nuovi materiali: il progetto MEL 24
Scenari e prospettive future per i nuovi materiali 25
I trend per i nuovi materiali 25
Biomateriali 26
Materiali circolari 27
Le aree applicative dei nuovi materiali 28
Il manifesto per i materiali avanzati del 2030 31
Il grafene e la grafine: quali scenari possibili per i "materiali delle meraviglie"? 35
Bibliografia 45

Introduzione

I materiali avanzati, e in particolare i nanomateriali, rappresentano le fondamenta per la prosperità dell'industria e della società di oggi, in quanto essenziali per il nostro benessere e gli elevati standard di vita delle nostre società, come riportato nella ricerca sui materiali avanzati per applicazioni industriali e a beneficio della società della Commissione Europea.

I nuovi materiali vengono utilizzati in tutti i settori (salute, elettronica, energia, mobilità e infrastrutture), nei prodotti industriali e nei beni di consumo come materiali da costruzione, materiali leggeri, batterie, imballaggi, smartphone, prodotti per la pulizia, cosmetici e molti altri.

L'impiego di nanotecnologie nei materiali avanzati svolgerà un ruolo di cruciale importanza in vista dell'obiettivo di affrontare le sfide individuate dal *Green Deal europeo*. Un'implementazione di successo di queste tecnologie abilitanti consentirà di incrementare la competitività dell'industria grazie al contributo fornito in tal modo allo sviluppo di innovativi prodotti migliorati e/o di processi più efficienti, che risponderanno alle sfide per la società esistenti oggi e a quelle che si presenteranno in futuro.

In questo report, mostreremo l'andamento del settore "nuovi materiali" in Italia e in Europa, ponendo l'attenzione su come HPC e IA siano tecnologie necessarie per lo sviluppo di nuovi materiali. Utilizzeremo casi d'uso per mostrarne l'esistenza e la possibilità di applicazione.

Inoltre, presenteremo i progetti in corso presso il Centro Nazionale ICSC, evidenziando le iniziative di ricerca e sviluppo che contribuiscono all'avanzamento di questo settore, nella collaborazione tra grandi aziende ed istituzioni di ricerca.

Infine, concluderemo il report presentando i trend di mercato attuali e possibilità di sviluppi futuri.



Eleonora Barelli
Eleonora.barelli@ifabfoundation.org



Eleonora Ocello
Eleonora.ocello@ifabfoundation.org



Ethel Gallo
Ethel.gallo@ifabfoundation.org



Ilaria Olivieri
Ilaria.olivieri@bi-rex.it

Lo stato dell'arte

L'ambito delle scienze dei materiali è costantemente in innovazione e alla ricerca di nuovi materiali o materiali avanzati che possano coniugare la necessità industriale di migliori materiali con la crescente attenzione alla sostenibilità economica e ambientale. Per nuovi materiali possiamo intendere i materiali innovativi, biodegradabili, compositi avanzati, nanomateriali, utilizzabili in tutti i settori di manifattura e produzione.

È innegabile che i nuovi materiali siano fortemente legati alle nuove tecnologie: superato l'approccio tradizionale alla ricerca, intelligenza artificiale e HPC portano a una significativa accelerazione del processo di progettazione e scoperta di nuovi tipi di materiali. Questi *data-driven materials* sono quindi in costante cambiamento, facilmente adattabili alle esigenze delle aziende, ma anche alle direttive nazionali ed europee in ambito sostenibilità e green.

L'Europa ha, difatti, già manifestato il suo interesse a sostenere la crescita di materiali innovativi che rispettino, allo stesso tempo, le indicazioni contenute nel cosiddetto *Green Deal* europeo. Da una parte, i nuovi materiali sono chiamati a essere sostenibili, a impatto zero sul clima, efficienti e parte integrante di un'economia circolare che interessi tutti gli stati membri. Dall'altro, le azioni di ricerca che stanno dietro alle nuove scoperte sono spesso e volentieri messe a disposizione in modalità *open source*, in modo da facilitare la collaborazione e accelerare ulteriormente la scoperta di nuovi composti.

La sostenibilità è quindi vista in un'ottica molteplice: oltre che essere ambientale, sociale ed economica, l'impegno di permettere l'accesso aperto alle nuove scoperte permette all'industria di migliorarsi costantemente. Le nuove tecnologie sono particolarmente adatte ad essere adoperate in questo campo: i dati che vengono condivisi ed elaborati portano a un miglioramento generale della capacità di creare e diffondere nuovi materiali.

Utilizzando la matrice STEPS – si può dare maggiore visione circa gli impatti che questo tipo di metodologia sta avendo sotto il profilo sociale, tecnologico, economico, politico e della sostenibilità:

- Sociale: il pubblico generale ha un interesse indiretto nella scienza dei materiali. È una ricerca che comunque può accelerare le innovazioni che possono portare a un miglioramento della qualità della vita attraverso nuovi prodotti e tecnologie. Salute, energia, green mobility, produzione industriale sono tutti ambiti nei quali la scienza dei materiali può mettere in moto trasformazioni e innovazioni trasformative, consentendo dunque di indirizzare tematiche di forte impatto per la società legate ai cambiamenti demografici, all'urbanizzazione, alla crisi climatica, alla digital transformation.
- Tecnologico: la data-driven materials è considerata un nuovo paradigma nella scienza dei materiali. In questo campo, i dati sono una risorsa preziosa e la conoscenza viene ricavata da insiemi di dati sui materiali troppo grandi o troppo complessi per il ragionamento umano

tradizionale. Per scoprire nuovi materiali, o per migliorare le caratteristiche e proprietà di quelli esistenti entrano oggi in gioco da un lato tutto quanto ruota intono al concetto di "open science", dall'altro i progressi nelle tecnologie dell'informazione. Advanced analytics, machine learning, AI, high performance computing sono ora parte integrante delle metodologie di ricerca sui materiali. Tuttavia, esistono diverse sfide che ostacolano i progressi nella scienza dei materiali basata sui dati: la veridicità dei dati, l'integrazione di dati sperimentali e computazionali, la longevità dei dati, la standardizzazione e il divario tra gli interessi industriali e gli sforzi accademici.

- Economico: i vari attori coinvolti nelle attività di ricerca, dal mondo accademico all'industria fino al mondo governativo e al settore pubblico in generale attribuiscono significati e aspettative diverse a un approccio data driven (e AI driven) alla scienza dei materiali. La ricerca vera e propria viene svolta nelle università e nei dipartimenti di ricerca e sviluppo dell'industria. È in questi "luoghi" che si producono dati sui materiali ed è sempre in questi luoghi che i dati vengono utilizzati ed elaborati per essere integrati in nuove catene del valore. Dal canto loro, i decisori politici e le agenzie di finanziamento governative o private possono avere invece interesse a promuovere i dati della open science, supportando lo sviluppo scientifico con le loro politiche e decisioni di finanziamento. C'è poi un interesse pubblico, al quale abbiamo già fatto cenno. Insieme, questi attori formano un ecosistema di reciproco beneficio, la cui vitalità è cruciale per il successo e la longevità per questo nuovo approccio alla scienza dei materiali.
- Politico: su questi temi è importante capire cosa stia facendo l'Europa, proprio perché l'innovazione abilitata anche dai nuovi materiali è cruciale per la competitività della UE nel suo insieme. Composti chimici, e materiali avanzati, inclusi i nanomateriali, sono essenziali e vengono utilizzati in tutti i settori, come salute, elettronica, energia, mobilità, costruzioni e in prodotti industriali e di consumo che spaziano dalle batterie al packaging, dai prodotti per la pulizia ai cosmetici, dai farmaci ai materiali da costruzione. La ricerca deve comunque puntare allo sviluppo di materiali superiori nelle prestazioni, ma anche sicuri, sostenibili e circolari. Per questo motivo, l'Unione Europea in questi anni ha diramati diverse direttive, delle quali è importante tener conto. Nel Green Deal Europeo, ad esempio, si parla di materiali avanzati e di materie prime critiche, per un'industria a zero emissioni ed equo scambio commerciale; nello Zero Pollution Action Plan si punta a ridurre l'inquinamento di aria, acqua e suolo; nella Chemicals Strategy for Sustainability si parla di criteri di sicurezza e sostenibilità per le sostanze chimiche e un di piano strategico per la ricerca e l'innovazione; la Sustainable Products Initiative punta a rendere tutti gli aspetti della progettazione, produzione, uso e vendita dei prodotti più ecologici e circolari, affrontando anche la presenza di sostanze chimiche dannose; il Critical Raw Materials Act riconosce l'importanza dei materiali avanzati per l'efficienza e la circolarità dei materiali e annuncia un piano

coordinato con i paesi dell'UE; infine il Net Zero Industry Act richiede capacità produttive più forti per le tecnologie pulite nell'UE, includendo materiali avanzati innovativi. Il 27 febbraio di quest'anno, la Commissione ha adottato una Comunicazione su "Advanced Materials for Industrial Leadership" che prevede una serie di azioni dalla ricerca alla commercializzazione per promuovere il design, lo sviluppo e l'uso dei materiali avanzati in Europa. Una delle azioni previste è la proposta di una partnership co-programmata con l'industria: Innovative Materials 4 EU (IM4EU).

- Sostenibilità: c'è un urgente bisogno di portare la ricerca e lo sviluppo di materiali innovativi al centro degli sforzi attuali per la sostenibilità. Da un lato, servono nuovi materiali che utilizzino energia e materie prime rinnovabili, chimica avanzata, fisica, biologia sintetica e intelligenza artificiale a supporto delle iniziative che puntano al raggiungimento di emissioni nette zero e alla promozione di una economia circolare. Dall'altro, bisogna considerare che la scienza dei materiali tocca ogni aspetto della vita umana, dall'energia rinnovabile all'efficienza energetica, dalle nanotecnologie alla salute, alla costruzione, al trasporto, ai processi di produzione, al riciclaggio e molto altro. Ed è qui che il contributo di questo ambito di ricerca è importante, sia a protezione dell'ambiente sia per garantire un futuro migliore alle generazioni a venire. Servono materiali e dispositivi innovativi e avanzati per favorire la transizione verso tecnologie più ecologiche e contribuire a un futuro sostenibile, coprendo tutti gli aspetti coinvolti nella loro produzione e applicazione: dalla progettazione alla fabbricazione, dalla caratterizzazione ai test, dalla scalabilità all'analisi del ciclo di vita.

AI e HPC nel campo dei nuovi materiali

Nell'ambito della scienza dei materiali l'innovazione è una costante, così come una costante è la ricerca che guida la scoperta dei nuovi compositi che si stanno rivelando cruciali per il progresso tecnologico e industriale.

Ma… come possiamo sfruttare la data science e l'intelligenza artificiale per accelerare e ottimizzare la scoperta e lo sviluppo di questi materiali innovativi? È questo uno dei temi di cui si è discusso nelle due giornate di TEHA Technology Forum 2024 e di cui si è parlato nell'articolo "Data-driven materials, l'AI generativa alla prova della scienza dei materiali" di Tech4Fruture.

Da quanto emerso:

- la combinazione di intelligenza artificiale e high-performance computing permette di ridurre drasticamente i tempi necessari per la scoperta e l'implementazione di nuovi materiali. Ad esempio, la ricerca di elettroliti solidi per batterie allo stato solido ha visto una riduzione del numero di materiali canditati da oltre 32 milioni a 18 in meno di 80 ore.
- La ricerca data-driven richiede una maggiore collaborazione tra centri di ricerca, industria e politica. Questa sinergia è essenziale per il passaggio dalla fase di ricerca alla produzione su larga scala, garantendo che le innovazioni possano essere applicate rapidamente e in modo efficiente.
- I nuovi materiali sviluppati attraverso metodi data-driven hanno potenziali applicazioni che possono migliorare la sostenibilità ambientale e promuovere un'economia circolare. Inoltre, l'efficienza nei processi di scoperta e sviluppo può generare significativi risparmi economici e creare nuove opportunità di mercato, specialmente nei settori energetico, medico ed elettronico.

Un esempio concreto dell'approccio data-driven materials è una ricerca condotta da un gruppo di ricercatori del Physical and Computational Sciences Directorate del Pacific Northwest National Laboratory di Richland, con l'obiettivo di sviluppare migliori batterie allo stato solido. Gli autori hanno combinato modelli di Intelligenza Artificiale con HPC per scoprire nuovi materiali per elettroliti allo stato solido. Hanno esplorato oltre 32 milioni di candidati, prevedendo circa mezzo milione di materiali potenzialmente stabili. Il processo di screening ha così identificato 18 candidati promettenti con nuove composizioni. Gli scienziati hanno utilizzato circa 100 virtual machines nel cloud completando il processo in meno di 80 ore.

L'approccio data-driven alla scienza dei materiali non solo sta ridefinendo i confini della ricerca scientifica, ma sta anche gettando le basi per un futuro più sostenibile e tecnologicamente avanzato. La sfida ora è sfruttare appieno questo potenziale, garantendo che le promesse di questa nuova era dell'innovazione si traducano in realtà tangibili per il bene comune.

GenAI nel campo dei nuovi materiali

Secondo McKinsey nel report "New oppprtunities for gen AI in energy and materials" il potenziale dell'IA generativa di accelerare la crescita e ridurre i costi non può essere ignorato. Questo è particolarmente vero per il settore dell'energia e dei materiali, che si basa fortemente sui dati e sull'analisi per l'innovazione e comprende settori costruiti su processi sempre più sfumati e complicati. Stabilire queste capacità in anticipo e assicurarsi un punto d'appoggio nell'IA generativa ora potrebbe dare alle aziende una vantaggiosa capacità di adottare rapidamente modelli più avanzati in futuro; ci si aspetta che i modelli linguistici di grandi dimensioni (LLM) aumentino esponenzialmente in termini di grandezza e potenza nei prossimi due o tre anni. In effetti, i modelli avanzati stanno già mostrando miglioramenti sostanziali rispetto ai modelli dei primi mesi del 2023, ampliando la gamma di casi d'uso tecnicamente fattibili. Come per l'analisi tradizionale - e le tecnologie digitali prima di queste - è probabile che le organizzazioni scelgano di vedere l'IA generativa non come la destinazione finale, ma piuttosto come un potente nuovo strumento per realizzare il pieno potenziale dell'organizzazione.

I settori del petrolio e del gas, dell'agricoltura, dell'energia elettrica, della chimica e dei materiali e dell'industria mineraria sono in una posizione unica per sfruttare il potere dell'IA generativa per trasformare parti del business, sia in termini di back office e casi interfunzionali, sia in termini di attività principali e operazioni.

Ci sono due categorie di casi d'uso che probabilmente possono applicarsi in queste industrie: quelli più semplici e quelli considerati "moonshot" (ambiziosi).

I casi d'uso più semplici generalmente non richiedono molta esperienza tecnica o specializzazione per essere implementati. Gli esempi più comuni includono funzioni standard di back-office, come assistenti virtuali che automatizzano funzioni amministrative o chatbot per il servizio clienti, o anche "copiloti" per sviluppatori software e data scientist, che possono fornire un notevole incremento di produttività ma che sono diventati disponibili pronti all'uso solo di recente.

Al contrario, i casi d'uso "moonshot" sono più innovativi e di conseguenza richiedono più personalizzazione - a volte persino un LLM addestrato da zero. E sebbene i casi d'uso "moonshot" abbiano il potenziale di fornire un valore significativamente maggiore, richiedono anche un sostanziale investimento iniziale in capacità e infrastrutture. Di conseguenza, l'applicazione dell'IA generativa per questi casi d'uso può variare in base alle particolari sfumature di ciascun sottosettore e di ciascuna parte della catena del valore.

Esempi di casi d'uso "moonshot" nell'industria includono i seguenti:

- Utilities. Le organizzazioni con diverse linee di trasmissione, oleodotti e altre infrastrutture remote spesso spendono milioni di dollari per l'integrità degli asset. I modelli di corrosione e manutenzione predittiva possono essere riaddestrati con registri di ispezione precedentemente inutilizzabili e non strutturati, migliorando le prestazioni. Ciò include l'integrazione di molte fonti di dati, compresi i registri tradizionali, come danni passati, ispezioni visive e dati dai sensori sull'asset stesso. Qui, l'IA generativa può migliorare significativamente l'efficacia di una funzione

aziendale fondamentale sia per la continuità delle operazioni che per la sicurezza.

- Aziende petrolifere e del gas. Modelli specializzati, estesi dalle applicazioni di elaborazione delle immagini, possono elaborare, interpolare e interpretare costosi dati sismici per identificare attributi chiave (come la localizzazione delle faglie o la classificazione diretta degli idrocarburi).
- Aziende minerarie. Le miniere possono migliorare la performance dei modelli contribuendo con dati raccolti in manuali di manutenzione, ordini di lavoro storici, procedure, inventari di strumenti e database di parti. Ciò può abilitare un potente assistente IA per i tecnici di manutenzione, aiutando a semplificare il lavoro e aumentare l'affidabilità.
- Aziende chimiche. Vasti database chimici possono essere sfruttati per creare modelli che possono prevedere le proprietà di nuovi prodotti chimici, riducendo sostanzialmente il tempo di ricerca.
- Aziende agricole. Analizzando i dati su condizioni meteorologiche, condizioni del suolo, pressione dei parassiti e altro, le aziende agronomiche possono costruire consulenti virtuali alimentati dall'IA generativa. Questi consulenti possono identificare rischi e opportunità personalizzati per coltivatori, gestori di fattorie e operatori agricoli, accessibili 24 ore su 24, 7 giorni su 7, a basso costo. L'IA generativa può anche sintetizzare un'ampia gamma di dati per generare scenari che permettono alle aziende agronomiche di simulare diversi eventi e fornire output più accurati.

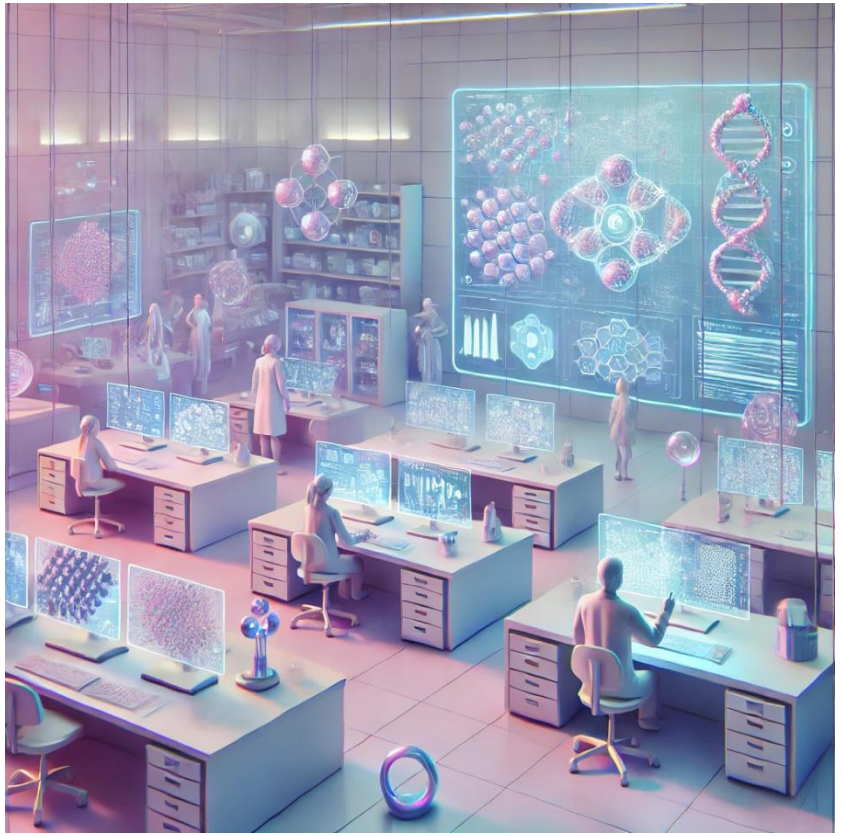


Figura 1: Gen AI per New Materials (credits: Osservatorio sulle tendenze e le applicazioni del Supercalcolo, immagine generata con l'utilizzo di Intelligenza Artificiale)

Nuovi materiali e supercalcolo: quali casi d'uso?

Per comprendere meglio come le innovazioni tecnologiche stanno influenzando il settore dei nuovi materiali, abbiamo diffuso un questionario tra professionisti del settore, ricercatori e organizzazioni, per raccogliere progetti e use cases nel settore.

I casi d'uso raccolti andranno a illustrare quali sono le innovazioni nel campo dei nuovi materiali, come questi si stiano evolvendo grazie alle nuove tecnologie, e in definitiva quale sono le progettualità che si stanno realizzando e stanno cambiando il modo di pensare alla manifattura e ai materiali.

Nella descrizione dei casi, utilizzeremo un sistema di icone per indicare:

 abstract del progetto;

 benefici attesi e/o obiettivi del progetto;

 tecnologia, se presente, utilizzata nel progetto.

Per condividere nuovi casi d'uso, si può compilare il form al seguente link: https://forms.office.com/e/6ZNCp04rUW .

FLAMIN-GO: From pathobioLogy to synoviA on chip: driving rheuMatoId arthritis to the precisioN medicine GOal

L'artrite reumatoide (RA) è una malattia autoimmune dovuta all'infiammazione del liquido sinoviale che riveste le articolazioni. La risposta ai farmaci attuali è tutt'altro che ottimale e richiede trattamenti migliori. Il progetto FLAMIN-GO, finanziato dall'UE, propone di superare gli studi clinici convenzionali per testare l'efficacia di nuove modalità di trattamento attraverso lo sviluppo di una piattaforma organ-on-chip.

L'approccio FLAMIN-GO utilizza le biopsie dei pazienti per costruire modelli 3D che imitano la complessità dell'articolazione RA e possono essere adattati a ogni singolo paziente. L'idea è di utilizzare questi modelli per l'identificazione ottimale dei farmaci in meno di due mesi, offrendo un approccio più rapido, economico ed eticamente corretto per lo screening dei farmaci.

Vengono utilizzate simulazioni numeriche per l'ottimizzazione 2D e 3D della pala. Inoltre, verranno sfruttati algoritmi di intelligenza artificiale per il riconoscimento della maturità dell'oliva per ottimizzare il processo di raccolta partendo dalle coltivazioni meno resistenti alla caduta.

CNR NANOTEC
INSTITUTE OF NANOTECHNOLOGY

https://nanotec.cnr.it/en

Democratizing quantum simulations: Materys platform makes cutting-edge science accessible

L'impiego di metodi di simulazione computerizzata all'avanguardia in fisica, chimica e scienza dei materiali richiede competenze informatiche e matematiche applicate avanzate. Ciò include la padronanza di sistemi Unix-like, sistemi di accodamento, tecniche di parallelizzazione, nonché una profonda comprensione degli algoritmi e dell'architettura hardware. Questo scenario rappresenta un ostacolo significativo all'adozione delle tecniche di simulazione quantomeccanica, soprattutto nell'industria, dove promettono di rivoluzionare la ricerca e lo sviluppo.

La disponibilità di risorse di calcolo on-demand nel cloud e le più recenti tecnologie di gestione dei cluster e dei flussi di lavoro stanno rendendo possibile la progettazione di piattaforme online accessibili da un browser, in grado di nascondere queste complessità e di fornire soluzioni di simulazione avanzate come servizio. La piattaforma Materys è espandibile e organizzata in più livelli. Facilita lo sviluppo di applicazioni verticali completamente automatizzate, facilmente condivisibili con altri gruppi di ricerca. Tutti i parametri tecnici informatici sono selezionati automaticamente, consentendo agli utenti di concentrarsi esclusivamente sulla scienza.

Il progetto permetterà di abbassare i costi di utilizzo dei software di simulazione numerica e HPC: per chi li vuole provare non è più necessario assumere personale specializzato. La piattaforma permetterà un accesso semplificato e intuitivo.

Lo scopo del progetto è democratizzare l'uso del Supercalcolo, rendendolo accessibile anche a persone non specializzate.

MATERYS

https://www.materys.com/

MaX - Materials Design at the exascale

Comprendere, prevedere e scoprire le proprietà e le prestazioni dei materiali è fondamentale per realizzare le tecnologie che alimentano la nostra economia e forniscono uno sviluppo sostenibile alla nostra società. Per questo motivo, le simulazioni dei materiali sono diventate uno dei settori più in rapida crescita a livello mondiale, con una leadership europea riconosciuta nello sviluppo e nell'innovazione dell'ecosistema dei codici di simulazione quantistica. MaX parte da questo ecosistema per affrontare le sfide e sfruttare le opportunità derivanti dalle future architetture exascale e post-exascale, e per offrire potenti percorsi di scoperta e innovazione al servizio delle applicazioni scientifiche e industriali.

MaX comprende i gruppi di sviluppo dei codici europei lighthouse, i centri HPC che progettano e ospitano sistemi pre-exascale ed exascale e le principali aziende europee impegnate nello sviluppo di tecnologie exascale. Inoltre, porta una lunga esperienza nella formazione e nell'educazione della comunità e nella diffusione delle sue risorse sotto un ampio modello open source che include codici, flussi di lavoro e dati FAIR. Il lavoro di MaX mira, quindi, a far crescere le prestazioni dei codici, a consentire capacità di simulazione "chiavi in mano" e a formare e coinvolgere sviluppatori e utenti nello sfruttare appieno questi potenti strumenti per la scoperta e l'innovazione.

La simulazione di nuovi materiali richiede codici scientifici per studiare le proprietà fisiche, chimiche ed elettroniche dei materiali e potenti supercomputer per eseguire tali codici complessi e dispendiosi dal punto di vista energetico. Il progetto porta codici scientifici accurati a lavorare con computer 1000 volte più veloci, più operativi ed ecosostenibili.

L'obiettivo centrale di MaX sviluppare e sostenere codici scientifici open source selezionati dalla comunità nel campo delle simulazioni di struttura elettronica e della modellazione dei materiali. Questi codici fanno un forte utilizzo HPC e MaX si concentra sull'ottimizzazione e la distribuzione di questi codici su macchine EuroHPC. I risultati di queste simulazioni software sono spesso utilizzati per addestrare modelli di intelligenza artificiale (tra gli altri) e possono produrre grandi quantità di dati simulati e curati (da utilizzare successivamente nel contesto dell'analisi dei dati).

Consiglio Nazionale delle **Ricerche**

https://www.cnr.it/

MAX DRIVING THE EXASCALE TRANSITION

https://www.max-centre.eu/

Recycling and Repurposing of Plastic Waste for Advanced 3D Printing Applications

Il polimero rinforzato con fibre di carbonio (CFRP), leggero e resistente, è sempre più utilizzato nelle strutture di aerei e navi, così come nelle pale delle turbine eoliche e nelle biciclette ad alta tecnologia. Il suo crescente utilizzo ha anche evidenziato la necessità di sviluppare metodi di smaltimento dei rifiuti di componenti in plastica e CFRP al termine del ciclo di vita. Il progetto Repair3D, finanziato dall'UE, svilupperà percorsi di bonifica e di riconversione, attuando soluzioni nanotecnologiche avanzate, produzione additiva e risorse riciclate per la fabbricazione di prodotti stampati in 3D ad alto valore aggiunto. Sfruttando il potenziale della progettazione ecocompatibile e consentendo l'integrazione di opzioni intelligenti intrinseche di auto-rilevamento, auto-riparazione e riciclaggio, il progetto creerà un processo di riciclaggio distribuito implementabile su scala locale.

Il progetto mira allo sviluppo di percorsi innovativi di recupero e riutilizzo di componenti in plastica e polimeri rinforzati con fibre di carbonio (CFRP) a fine vita. Questo obiettivo sarà raggiunto impiegando soluzioni nanotecnologiche avanzate, la produzione additiva (AM) e risorse riciclate, per la produzione di prodotti stampati in 3D ad alto valore aggiunto con funzionalità avanzate. In questo modo, la combinazione di AM, trattamento dei polimeri e tecnologie di riciclaggio potrebbe costituire un nuovo paradigma di processo di riciclaggio distribuito, facilmente implementabile su scala locale in collaborazione con il settore industriale e le strutture di raccolta, al fine di creare prodotti competitivi e altamente personalizzabili a costi di produzione inferiori, in un ambiente digitale flessibile che svela appieno il potenziale dell'eco-design e consente l'integrazione di opzioni intelligenti intrinseche di auto-rilevazione, auto-riparazione e riciclaggio.

Warrant Hub
TINEXTA GROUP

https://www.warranthub.it/

4D printing: nuovi materiali per la fabbricazione additiva del futuro

Il 4D printing rappresenta una rivoluzione tecnologica che estende le capacità della stampa 3D, integrando la dimensione del tempo. La stampa 4D utilizza materiali intelligenti, noti anche come materiali programmabili o attivi, capaci di modificare la loro forma, proprietà o funzionalità in risposta a stimoli esterni come calore, luce, umidità o campi magnetici. Le strutture così fabbricate diventano dinamiche, ovvero in grado di adattarsi all'ambiente circostante, aprendo nuove possibilità in molteplici campi di ricerca come la bioingegneria, il design e l'ingegneria aerospaziale. I nuovi materiali svolgono un ruolo cruciale nel progresso della stampa 4D, in quanto costituiscono le fondamenta per le funzionalità dinamiche e adattive che caratterizzano questa tecnologia. Tra i materiali più promettenti si annoverano i polimeri a memoria di forma, materiali capaci di "ricordare" una configurazione iniziale (forma permanente), a partire da una configurazione deformata (forma temporanea), se opportunamente stimolati (Figura 1).

L'attività di ricerca svolta presso il Laboratory of Programmable Materials and Structures mira al design di nuovi materiali e alla fabbricazione di strutture programmabili per applicazioni avanzate.

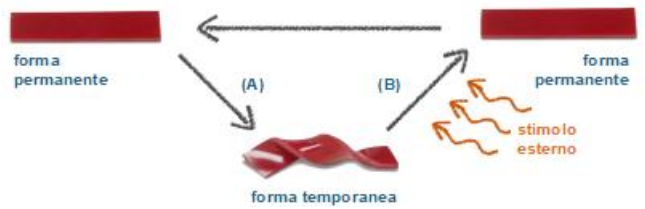


Figura 1: Meccanismo di funzionamento di un polimero a memoria di forma: (A) programmazione della forma temporanea, (B) recupero della forma permanente sotto l'azione di uno stimolo esterno

In questo framework, un caso studio è relativo alla stampa 4D di network semi-cristallini a base di policaprolattone (PCL), un polimero biocompatibile e biodegradabile di ampio utilizzo in applicazioni biomedicali. Le strutture così fabbricate possiedono un meccanismo a memoria di forma reversibile, molto promettente per diverse applicazioni biomedicali e specialmente nello sviluppo di costrutti 4D con proprietà meccano-strutturali programmabili, ovvero capaci di agire come regolatori meccanici.

https://www.code4bio.com/lab/

Iqubits - Integrated Qubits Towards Future High-Temperature Silicon Quantum Computing Hardware Technologies

IQubits è un progetto collaborativo di ricerca e innovazione che si occupa dello sviluppo e della dimostrazione sperimentale di bit quantistici integrati (qubit) e di circuiti di controllo e lettura nella tecnologia commerciale dei semiconduttori di silicio, come elementi fondamentali per l'implementazione delle future tecnologie hardware emergenti di Quantum Computing.

Gli attuali sviluppi delle tecnologie quantistiche hardware si limitano principalmente a qubit integrati fabbricati nei laboratori di ricerca e funzionanti a temperature criogeniche estreme dell'ordine di decine o centinaia di milli-Kelvin, con circuiti di controllo e di lettura esterni al chip con i qubit, cioè al chip quantistico.

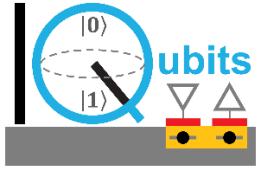
Le limitazioni intrinseche all'integrazione dovute all'approccio multi-chip introducono ostacoli drammatici alla scalabilità delle tecnologie hardware necessarie per garantire l'integrazione, il controllo e la lettura di centinaia, migliaia e persino milioni di qubit richiesti per gli sviluppi delle future tecnologie di calcolo quantistico emergenti.

L'obiettivo del progetto IQubits è quello di superare queste importanti barriere scientifiche e tecnologiche sviluppando qubit integrati, circuiti di controllo e di lettura in grado di operare a temperature criogeniche più elevate e di essere integrati nello stesso chip in tecnologie commerciali al silicio ultra scalate, aprendo così la strada al passaggio delle tecnologie quantistiche dai laboratori di ricerca alle fonderie di semiconduttori per la produzione su larga scala.

Per ottenere gli obiettivi di progetto, il quantum computing è necessario per la validazione dei modelli. Inoltre, l'HPC è necessario per simulare i device da implementare.

CNR NANOTEC
INSTITUTE OF NANOTECHNOLOGY

https://nanotec.cnr.it/en



https://www.iqubits.eu/

Nuovi Materiali nel Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data e Quantum Computing

Il Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data e Quantum Computing tratta il tema dei nuovi materiali entro lo Spoke 7 – Materials & Molecular Sciences, guidato dal Consiglio Nazionale delle Ricerche e dalla SISSA.

SPOKE 7
Materials
& Molecular Sciences

Tale gruppo di lavoro, che coinvolge 11 Università e enti di ricerca e 4 aziende, mira a rafforzare la ricerca applicata nello sviluppo, nell'implementazione e nella distribuzione di software scientifici ad alte prestazioni per la simulazione multi-scala di materiali e sistemi molecolari complessi. L'obiettivo è anche quello di ottimizzare e ampliare lo spettro applicativo di questi software, per affrontare le sfide scientifiche, tecnologiche e sociali del nostro paese. Lo Spoke 7 è inoltre incaricato di abilitare e facilitare l'accesso a imponenti risorse di calcolo da parte di soggetti pubblici e privati, per applicazioni di tecnologie emergenti ai nuovi materiali, e indirizzare gli sforzi della ricerca nazionale nei campi delle scienze molecolari e dei materiali verso le applicazioni strategiche identificate dal PNRR.

Oltre allo Spoke 7, il tema dei nuovi materiali è toccato anche da altri Spoke, all'interno di programmi di ricerca e innovazione interdisciplinari.

Presentiamo dunque in questo report 7 progetti, finanziati da ICSC, che stanno venendo realizzati a guida degli enti privati associati allo Spoke sul tema dei nuovi materiali.

La transizione energetica passa attraverso i materiali green: il progetto EET

La scienza dei materiali computazionale ha un'importanza strategica significativa per molte applicazioni industriali. Da un lato, può aiutare a colmare lacune di conoscenza laddove le proprietà di sistemi complessi non possono essere completamente comprese attraverso la sola sperimentazione, dall'altro può aiutare nella progettazione di nuovi materiali funzionali per applicazioni specifiche.

Il progetto "EET - Accelerating the pace of the energy transition through simulation-guided discovery of advanced green materials", guidato da ENI in partnership con il CNR, ENEA, il Politecnico di Torino, SISSA e l'Università di Trieste, rappresenta un passo avanti nella ricerca di nuovi materiali verdi che potrebbero rivoluzionare il modo in cui affrontiamo la transizione energetica.

Le simulazioni computazionali sono utilizzate in questo progetto per studiare due tipi di materiali: gli elastomeri rinforzati, usati negli pneumatici delle automobili, e i materiali a base di carbonio, utili per immagazzinare e filtrare gas come idrogeno e gas naturale.

Uno degli obiettivi principali è migliorare le prestazioni e l'efficienza di questi materiali, rendendoli più adatti alle esigenze dell'industria moderna, in particolare nel contesto della transizione energetica. Le simulazioni al computer permettono di esaminare questi materiali a livello atomico, consentendo ai ricercatori di ottimizzare le loro proprietà per applicazioni specifiche, come la creazione di pneumatici più durevoli e l'ottimizzazione dello stoccaggio di gas puliti.

Il progetto non si limita a utilizzare metodi già esistenti, ma punta anche a sviluppare nuovi strumenti e algoritmi che renderanno le simulazioni ancora più accurate ed efficienti. Ad esempio, saranno sviluppati e testati nuovi potenziali interatomici, strumenti matematici che permettono di modellare come gli atomi interagiscono tra loro all'interno di un materiale. Alcuni di questi potenziali saranno generati utilizzando l'intelligenza artificiale, aprendo nuove strade nella progettazione di materiali avanzati.

Verso nuovi materiali per le batterie: il progetto ELIO

Le batterie sono al centro della rivoluzione verde, essendo cruciali per l'immagazzinamento di energia rinnovabile e per il funzionamento di veicoli elettrici. Tuttavia, per renderle più efficienti, sicure e durature, è necessario comprendere a fondo le reazioni chimiche che avvengono all'interno di queste batterie.

Per rispondere a questa sfida è nato il progetto "ELIO - ELectrode-electrolyte Interface in Operando, a multiscale modeling approach", progetto inter-spoke tra Spoke 7 – Materials & Molecular Sciences e Spoke 2 – Fundamental Research & Space Economy, a guida industriale di ENI, in partnership con CNR, Politecnico di Torino, Università della Calabria, Università di Napoli, Università di Torino e Università di Trieste.

Il progetto ELIO si propone di esplorare e migliorare le prestazioni delle batterie avanzate, in particolare quelle al litio e al sodio, che sono fondamentali per il futuro dell'energia sostenibile. ELIO utilizza simulazioni avanzate per comprendere meglio ciò che accade all'interno delle batterie, proprio dove gli elettrodi e gli elettroliti si incontrano.

Le batterie al litio e al sodio sono chiave per immagazzinare energia, ma per renderle più efficienti, sicure e durevoli, è essenziale capire a fondo le interazioni chimiche e fisiche che avvengono all'interfaccia tra l'elettrodo (spesso fatto di litio o sodio metallico) e l'elettrolita (spesso un liquido ionico). È qui che si formano strati protettivi chiamati SEI (Solid Electrolyte Interphase), che influenzano direttamente le prestazioni della batteria.

Attraverso l'uso di simulazioni multiscala, il progetto ELIO esplora tre aspetti cruciali: la formazione dello strato SEI, la struttura e la dinamica dell'elettrolita, e il trasporto dei cationi di litio o sodio all'interfaccia. Comprendere questi processi permetterà di progettare materiali più performanti, che potrebbero portare a batterie con maggiore capacità, durata e sicurezza.

eni

Consiglio Nazionale delle Ricerche

Politecnico di Torino

UNIVERSITÀ DELLA CALABRIA

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI FEDERICO II

UNIVERSITÀ DI TORINO

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Utilizzare il grafene per ridurre l'attrito nelle componenti dei veicoli: il progetto ASD

Immagina un futuro in cui le automobili e gli aerei consumano meno carburante, producono meno emissioni e richiedono meno manutenzione, tutto grazie a rivestimenti speciali che riducono la resistenza dell'aria e si puliscono da soli.

Questo è l'obiettivo di un progetto di ricerca innovativo, che vede coinvolti scienziati e ingegneri di alcune delle principali aziende, università e centri di ricerca italiani. Il progetto "ASD - Atomistic simulations of damage, adhesion and drag reduction of graphene-based coatings" è infatti guidato da Leonardo, in partnership con CNR, ENEA, SISSA, Università Milano-Bicocca, Università di Firenze, Università di Pisa, Università di Torino ed Università di Trieste.

Il cuore di questo progetto è lo studio dei rivestimenti a base di grafene, un materiale rivoluzionario noto per la sua resistenza, leggerezza e capacità di condurre elettricità. I ricercatori coinvolti in ASD stanno cercando di capire come questi rivestimenti potrebbero ridurre la resistenza aerodinamica, ovvero quella forza che si oppone al movimento di un oggetto nell'aria, migliorando così l'efficienza dei veicoli.

Utilizzando atomistiche computazionali avanzate e approcci multi-scala, il progetto esamina come l'aria ad alta velocità interagisce con superfici rivestite di grafene rispetto a quelle metalliche tradizionali. Si studia anche come il grafene aderisce ai substrati e come si formano eventuali difetti sotto l'azione dell'aria, per capire come migliorare ulteriormente le proprietà di questi rivestimenti.

Il lavoro svolto in questo progetto potrebbe aprire la strada a nuovi materiali che non solo migliorano le prestazioni dei veicoli, ma che potrebbero essere utilizzati anche in applicazioni spaziali, dove ridurre la resistenza e mantenere le superfici pulite sono sfide cruciali. In altre parole, questo progetto non riguarda solo migliorare l'efficienza dei mezzi di trasporto che usiamo ogni giorno, ma potrebbe anche contribuire a rendere più sostenibile l'esplorazione dello spazio.

LEONARDO

Consiglio Nazionale delle Ricerche

ENEA
Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile

SISSA

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO BICOCCA

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

UNIVERSITÀ DI PISA

UNIVERSITÀ DI TORINO

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Produrre plastica sostenibile a partire dai residui dell'industria agricola: il progetto AWAD

Se pensiamo alla plastica, difficilmente pensiamo ad un materiale virtuoso in ottica di riciclabilità e sostenibilità. Ma cosa accadrebbe se i rifiuti provenienti dall'industria agricola, come bucce di frutta o residui di colture, potessero essere trasformati in materiali preziosi per la produzione di plastica sostenibile?

È questa la sfida che IFAB, in partnership con CNR, Università di Pisa e Università di Trieste, sta indagando nel progetto "AWAD - Agro-industrial Waste valorization through Machine-learning Accelerated Design".

Il progetto ambisce ad utilizzare i rifiuti agroindustriali per creare biofiller, ossia additivi che possono essere miscelati con la plastica per renderla più ecologica e meno dipendente dalle risorse fossili.

Tuttavia, l'integrazione di questi biofiller non è semplice. Alcuni problemi tecnici, come la sensibilità al calore durante la lavorazione e la compatibilità tra i biofiller e la plastica, ne hanno finora limitato l'uso su larga scala.

Per superare queste sfide, il progetto AWAD utilizza tecniche avanzate di machine learning e calcolo ad alte prestazioni. Grazie a queste tecnologie avanzate, i ricercatori possono simulare in anticipo e progettare strategie per rendere i biofiller più stabili al calore e meglio compatibili con le diverse tipologie di plastica.

Questo processo di ottimizzazione permetterà di sviluppare nuovi materiali biocompositi che potrebbero essere utilizzati su scala industriale, contribuendo a una gestione più sostenibile dei rifiuti e alla creazione di materiali innovativi ed ecologici.

iFAB
INTERNATIONAL FOUNDATION
BIG DATA AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE
FOR HUMAN DEVELOPMENT

Consiglio Nazionale delle Ricerche

UNIVERSITÀ DI PISA

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Supercalcolo per imballaggi sostenibili: il progetto PISA

Immaginate un mondo in cui gli imballaggi alimentari non solo preservano la freschezza dei prodotti, ma fanno anche bene al pianeta. Questo è un futuro che sempre più spesso le aziende del settore alimentare considerano per effettuare scelte strategiche in termini di prodotti da mettere sul mercato.

Per esempio, Granarolo, un importante attore nel settore alimentare, si è prefissata un obiettivo ambizioso: ridurre l'uso di plastiche tradizionali e abbattere le emissioni di CO2 di 2.500 tonnellate entro il 2026. Per raggiungere questo traguardo, l'azienda punta a utilizzare plastiche derivate da risorse biologiche, che possono essere riciclate più facilmente rispetto ai materiali plastici convenzionali.

Il cuore del progetto "PISA – Harnessing HPC: Granarolo's Bio-Driven Revolution for Sustainable Packaging", guidato da IFAB in partnership con CNR, ENEA, Università di Pisa, Università di Trento e Università di Trieste, consiste nell'uso delle tecnologie di calcolo ad alte prestazioni per sviluppare e ottimizzare nuovi materiali di imballaggio sostenibili.

Il supercalcolo permette infatti di eseguire simulazioni complesse e analisi dettagliate per progettare materiali che non solo riducono l'impatto ambientale, ma soddisfano anche i requisiti di riciclaggio e, dunque, circolarità.

Attraverso l'integrazione di diverse tecniche di modellazione HPC, il progetto mira a selezionare le soluzioni di imballaggio più innovative ed ecologiche. Questo approccio multidisciplinare non solo accelera la ricerca e lo sviluppo di nuovi materiali, ma garantisce anche che siano efficaci e praticabili a livello industriale.

iFAB
INTERNATIONAL FOUNDATION
BIG DATA AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE
FOR HUMAN DEVELOPMENT

Consiglio Nazionale delle Ricerche

ENEA
Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile

UNIVERSITÀ DI PISA

UNIVERSITÀ DI TRENTO

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Inventare i packaging del futuro con simulazioni multiscala: il progetto SFFP

Per affrontare le sfide di sostenibilità a cui l'intero ecosistema sociale si sta affacciando, anche l'industria alimentare sta attraversando una transizione verso imballaggi più ecologici in tutte le fasi di progettazione, produzione e riciclaggio.

Il progetto "SFFP - Sustainable flexible food packaging: accelerating material discovery via multiscale modelling", guidato da IFAB in collaborazione con Lavazza e in partnership con CNR, ENEA, Politecnico di Torino, Università della Calabria, Università di Pisa, Università di Trento e Università di Trieste, mira a progettare un sistema di imballaggio flessibile, a strato singolo e monomateriale per sostituire le soluzioni multi-strato attualmente adottate dall'industria alimentare.

Infatti, gli attuali sistemi di imballaggio combinano fogli di alluminio o polietilene con carta o cartone, che garantiscono durata e preservano l'aroma e la freschezza del cibo. Tuttavia, gli strati di plastica sono praticamente impossibili da separare, rendendo difficile il loro riciclaggio e, quindi, non soddisfano i requisiti di sostenibilità che molte industrie stanno perseguendo per la loro transizione ecologica.

Spinti da queste esigenze industriali, imprenditoriali ma anche sociali, il progetto mira a realizzare un prodotto "circolare" e riciclabile, efficace come alternativa concreta ai materiali tradizionalmente impiegati e capace di supportare lo sviluppo di un modello bio-economico. La nuova alternativa di imballaggio deve fornire protezione meccanica, preservare l'integrità del cibo e, soprattutto, essere ambientalmente, socialmente ed economicamente sostenibile.

Per raggiungere questo ambizioso obiettivo, in SFFP vengono impiegate diverse tecniche di modellazione basate HPC, incluse simulazioni di dinamica molecolare atomistica e su scala grossolana, metodi agli elementi finiti, dinamica dei fluidi computazionale e metodi agli elementi discreti - per il design in-silico di tale nuova alternativa sostenibile per l'imballaggio alimentare, insieme all'adozione di standard di eco-design responsabili e circolari durante tutto il processo di progettazione.

Calcolo quantistico e nuovi materiali: il progetto MEL

Comprendere in modo dettagliato come avvengono le reazioni chimiche è fondamentale per progettare nuovi materiali con proprietà ottimizzate. Per fare questo, il calcolo quantistico può avere un ruolo di primo piano.

Il progetto "MEL - Molecular Energy Landscapes by Quantum Computing – Benchmark calculations", guidato da ENI in collaborazione con il Politecnico di Milano e l'Università dell'Aquila esplora questo tema in una partnership inter-spoke tra Spoke 10 – Quantum Computing e Spoke 7 – Materials and Molecular Sciences.

MEL esplora l'uso del calcolo quantistico per risolvere problemi complessi in chimica. Il cosiddetto "quantum computing" ha infatti il potenziale di affrontare sfide che i computer tradizionali non possono risolvere in modo efficiente, e una delle aree in cui potrebbe fare la differenza è la chimica computazionale, in particolare nello studio della struttura elettronica molecolare.

Quando si parla di struttura elettronica molecolare, ci si riferisce alla descrizione precisa delle energie e delle posizioni degli elettroni in una molecola. Questa descrizione è fondamentale per comprendere come avvengono le reazioni chimiche, specialmente in contesti industriali come la catalisi, dove materiali e composti chimici vengono trasformati in modo controllato per ottenere prodotti specifici.

Il progetto MEL si propone di testare se il calcolo quantistico può essere utilizzato per calcolare con precisione le energie molecolari e le funzioni d'onda, ossia le descrizioni matematiche degli stati elettronici di una molecola, durante reazioni chimiche di interesse industriale. In particolare, il progetto si concentra su reazioni che coinvolgono la polimerizzazione dello stirene, un processo importante nella produzione di plastica e altri materiali polimerici.

Utilizzando avanzate tecniche di calcolo quantistico, i ricercatori coinvolti nel progetto puntano a raggiungere un livello di "accuratezza chimica", con errori nelle stime delle energie relative che non superano 1 kcal/mol. Questo grado di precisione è essenziale per prevedere correttamente il comportamento delle molecole durante le reazioni chimiche, migliorando così la capacità di progettare processi industriali più efficienti e innovativi.

eni

POLITECNICO
MILANO 1863

UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DELL'AQUILA

Scenari e prospettive future per i nuovi materiali

Dopo aver analizzato lo stato dell'arte e dopo aver mostrato use case e progetti che vedono protagoniste le tecnologie abilitanti nella ricerca sui nuovi materiali, è giunto il momento di chiederci quali potranno essere le traiettorie di evoluzione futura di questo settore.

Presenteremo diversi scenari, non solo per numero e tematica di attenzione ma anche per approccio metodologico con il quale sono stati realizzati.

Alcuni scenari sono ottenuti come estrapolazione di trend passati e presenti, in modo anche quantitativo. Gli anglofoni, che hanno un vocabolario più ricco in tema di atteggiamento riguardo al futuro, chiamerebbero questo metodo "forecast", una previsione simil-deterministica, assestata sugli elementi di più probabile accadimento.

Altri scenari riportati sono invece realizzati con metodologie di "foresight" che in italiano tradurremmo sempre come previsione ma che fa riferimento ad una pluralità di scenari che considerano non solo gli orizzonti più probabili ma anche altri solo possibili, non necessariamente plausibili.

I trend per i nuovi materiali

La sostenibilità, in senso lato, sta assumendo sempre più rilevanza in ogni tipo di contesto. Negli ultimi anni, sono state enunciate numerose politiche e normative verso obiettivi di sostenibilità e molti investitori richiedono alle relative aziende di divulgare i dati ambientali. Così, le varie aziende stanno integrando nuovi processi e nuovi materiali sostenibili e/o a bassa emissione di carbonio. Secondo il sondaggio di Deloitte (2023a), il 59% degli intervistati ha dichiarato che le loro aziende hanno iniziato ad utilizzare materiali sostenibili, come materiali riciclati e prodotti a basse emissioni.

Dall'ultimo report di Deloitte in materia, "The future of materials" (2023b), emerge che i materiali come il cemento auto-riparante o i polimeri bio-riassorbibili (che permettono ai punti di sutura di assorbirsi nel corpo) rappresentano dei sostanziali progressi nel mondo dei materiali che possono migliorare il nostro modo di vivere e lavorare. Recentemente, ci sono stati notevoli miglioramenti nei settori della medicina, dell'elettronica, dell'automobile, dell'edilizia, dell'energia e dell'agricoltura che stanno facilitando nuove applicazioni di biomateriali, semiconduttori, materiali intelligenti, nanomateriali e plastiche e resine avanzate.

Da qui al 2050, in conformità ai nuovi obiettivi politici e regolamentari di sostenibilità, si ipotizza lo sviluppo di nuovi materiali che avranno un impatto diretto sui settori della salute, infrastrutture, trasporti, costruzioni, aerospazio e sui prodotti di consumo (si veda Figura 2). Verranno creati materiali più leggeri, più resistenti, più efficaci, più conduttivi, più sostenibili e più convenienti rispetto ai materiali tradizionali.

I bio-materiali e i materiali circolari sembrano essere quelli che avranno più possibilità di sviluppo e implementazione nel prossimo futuro.

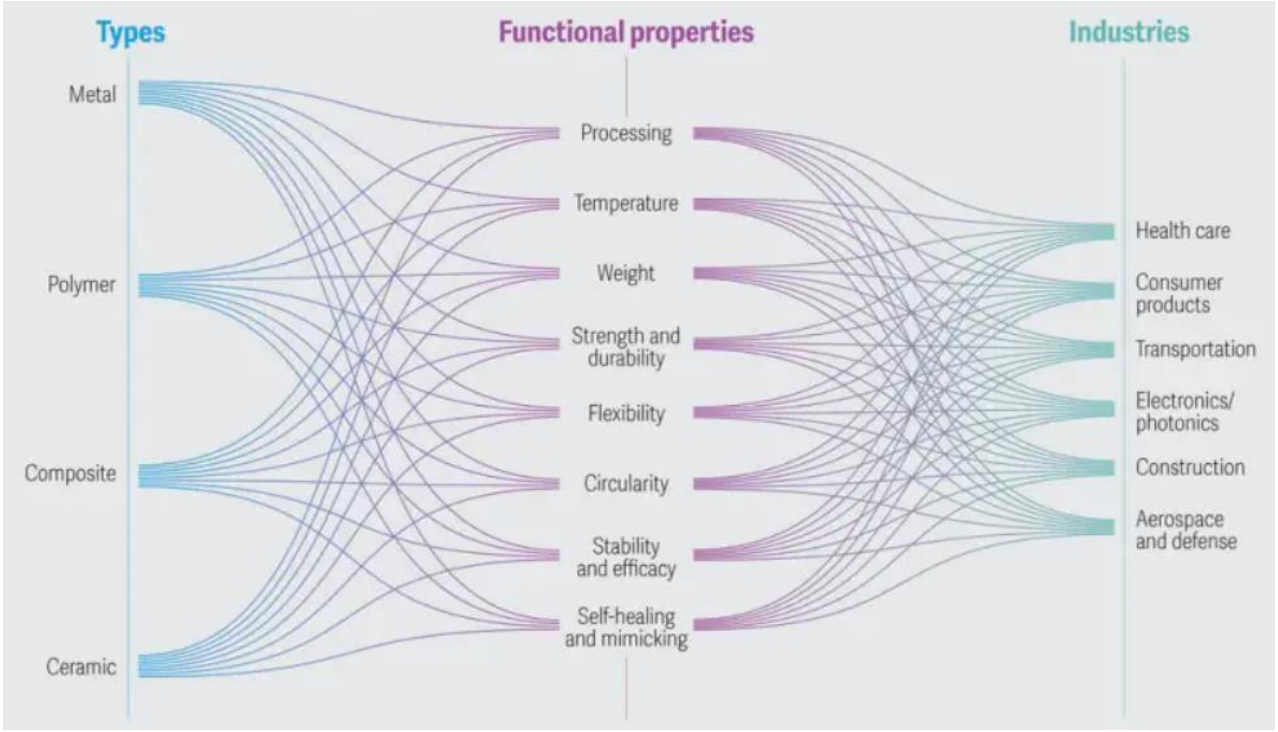


Figura 2. L'ecosistema dei materiali avanzati (credits: Deloitte).

Biomateriali

I biomateriali sono costituiti da materie prime naturali, da prodotti estratti dalle piante o da altre fonti organiche come amido, cellulosa, proteine. Questi possono essere a loro volta lavorati attraverso reazioni chimiche e biologiche per essere trasformati in fibre, film e resine. La domanda dei materiali a base biologica da parte dei consumatori è attualmente in crescita e si prevede che continuerà a crescere in futuro, man mano che le aziende si orienteranno verso materiali più sostenibili. Le bioplastiche globali rappresentano solo l'1% della produzione totale di materie plastiche ma potrebbero aumentare potenzialmente nel 2027.

La scalabilità di questi materiali però è più complessa. È necessario procedere gradualmente per garantire prestazioni e durate elevate, prestando attenzione alla lavorazione efficiente e al controllo di qualità. L'utilizzo di IA e altre tecnologie però può semplificare il processo di produzione, riducendo sprechi e costi.

L'infrastruttura ancora in fase di sviluppo nel mercato dei materiali biobased può rappresentare una sfida per l'analisi del ciclo di vita e gli sforzi di sostenibilità. Materiali "drop-in" possono ridurre le emissioni senza richiedere cambiamenti significativi nei processi di produzione, ma altri materiali possono richiedere una riprogettazione più ampia, comportando significativi investimenti in R&D e cambiamenti infrastrutturali.

Non tutti i materiali biobased sono biodegradabili o compostabili e quelli che lo sono possono richiedere condizioni specifiche per decomporsi correttamente.

Lo scenario che si delinea utilizzando biomateriale può essere di potenziale impatto ed è in effettiva crescita. Ciò nonostante, bisogna affrontare delle nuove sfide legate alla scalabilità della produzione, alla riprogettazione dei progetti ove necessaria e alla gestione dei rifiuti.

Materiali circolari

Le soluzioni circolari potrebbero ridurre i rifiuti e le emissioni, preservando maggiormente il valore economico dei prodotti. Le percentuali di riciclaggio domestico negli Stati Uniti sono aumentate dal 10% nel 1980 a poco più del 30% nel 2019. Tuttavia, tali percentuali variano notevolmente per prodotto, con il riciclaggio della plastica che è passato dal meno dell'1% nel 1980 al 9% oggi. Questo è paradossale, i prodotti chimici sono più preziosi dell'acciaio, del vetro e del cemento, ma vengono riciclati a tassi significativamente più bassi rispetto agli altri materiali. Sebbene le complessità del riciclaggio dei prodotti chimici, nel totale, possano renderlo più costoso, alcune aziende sembrano trovare modi per sviluppare soluzioni efficienti per ridurre i costi. Trovando modi economicamente vantaggiosi per utilizzare soluzioni circolari, è possibile preservare maggior valore dai prodotti chimici al termine della loro vita. Questo è di fondamentale importanza per i rifiuti della plastica, dato che la produzione è destinata a triplicare a livello globale entro il 2060.

Il riciclaggio meccanico frantuma meccanicamente la plastica e la rifonde in granulato (preservandone la struttura molecolare) per utilizzarla nella produzione di nuove plastiche. Sebbene il riciclaggio meccanico abbia il vantaggio di avere l'impronta di carbonio più bassa tra tutte le tecnologie di riciclaggio attualmente esistenti, può anche essere limitato da diversi fattori. In primo luogo, le plastiche che possono essere riciclate sono limitate per tipo e livello di contaminanti. In secondo luogo, il processo di riciclaggio meccanico porta a una qualità inferiore di riciclo della plastica. Di conseguenza, meno del 10% della plastica viene riciclato meccanicamente più di una volta. A causa di questi limiti, sono in corso studi per sviluppare nuovi processi per trattare una maggiore quantità di rifiuti di plastica per il riutilizzo.

Diversamente, tutte le forme di riciclaggio chimico (a volte chiamato riciclaggio avanzato o riciclaggio molecolare) producono "resina vergine" che possono essere utilizzate in applicazioni farmaceutiche e possono (almeno teoricamente) essere riciclate un numero infinito di volte senza comprometterne la qualità. Questi processi chimici rientrano in tre categorie distinte: purificazione, depolimerizzazione e conversione. Come i materiali di origine biologica, ci sono sfide nello scalare i processi di riciclaggio chimico. Infatti, mentre alcuni consumatori hanno dimostrato una volontà di pagare premi più alti per beni sostenibili, i consumatori tendono ad essere sensibili al prezzo, specialmente in periodi di recessione economica. Di conseguenza, alcuni investitori potrebbero considerare l'investimento in un grande impianto di riciclaggio relativamente rischioso dal punto di vista di mercato.

Per un futuro ormai prossimo, le aziende dovranno valutare i loro asset e i loro dati attuali per individuare opportunità di miglioramento e monitorare i progressi verso pratiche più sostenibili. Affinché le iniziative di sostenibilità siano economicamente sostenibili, bisognerà ricorrere a contratti a lungo termine, finanziamenti governativi e strategie per garantire la fedeltà dei clienti.

Le aree applicative dei nuovi materiali

La Commissione Europea, dietro consultazione con gli Stati Membri, ha individuato una lista di priorità di ricerca e innovazione sui nuovi materiali per accompagnare le "transizioni gemelle", ossia la transizione alla sostenibilità (transizione verde) e la transizione al digitale (transizione blu). Tali priorità sono articolate in quattro aree applicative: energia, mobilità, edilizia, elettronica.



Energia

Conversione e generazione di energia rinnovabile e a basso carbonio: materiali avanzati per migliorare la durata dei dispositivi che convertono le fonti di energia rinnovabile (RES), come catalizzatori, rivestimenti e impermeabilizzanti. È importante migliorare le condizioni ambientali operative (ad esempio, resistenza alla corrosione) e aumentare l'efficienza della conversione in diverse RES (ad esempio, pannelli fotovoltaici, turbine eoliche o pompe di calore).

Sistemi di accumulo di energia: materiali avanzati e più sostenibili per le tecnologie di accumulo di energia, come le tecnologie elettrochimiche (ad esempio, batterie e supercondensatori), tecnologie termiche e termochimiche (ad esempio, materiali a cambiamento di fase), o tecnologie chimiche.

Distribuzione energetica e rete di trasmissione: materiali avanzati per aumentare l'efficienza, la capacità, l'affidabilità e la durata della rete di distribuzione e trasmissione dell'energia. Esempi includono rivestimenti ad alte prestazioni per proteggere le infrastrutture contro corrosione, attrito, formazione di ghiaccio o altre soluzioni con materiali alternativi.

Combustibili rinnovabili: come i combustibili rinnovabili di origine non biologica e i combustibili sintetizzati che riducono l'impronta ambientale. Una delle principali sfide è sviluppare catalizzatori che siano sufficientemente attivi, stabili e a basso costo per produrre combustibili o chimici rinnovabili in grandi quantità.



Mobilità

Accumulo di energia e combustibili alternativi per i mezzi di trasporto tra cui, nello specifico:

- Batterie avanzate: batterie allo stato solido caratterizzate da maggiore efficienza, minore impatto ambientale nella produzione, ridotto utilizzo e sostituzione sostenibile delle materie prime critiche, miglior sicurezza, maggiore durata, prestazioni superiori, densità energetica elevata e maggiore riciclabilità.
- Sistemi a celle per idrogeno, ammoniaca e/o metanolo, con efficienza molto più alta e focalizzati su soluzioni di recupero del calore residuo; elettrolizzatori; catalizzatori.

Materiali avanzati ad alte prestazioni per trasporti leggeri e robusti tra cui:

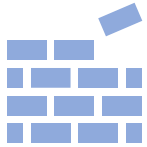
- Materiali avanzati e leggeri che combinano riduzione del consumo energetico con maggiore sicurezza, sia per gli occupanti dei veicoli sia per pedoni, ciclisti e altri utenti.
- Materiali compositi e strutture avanzate per veicoli, aerostrutture e componenti dei motori, inclusi termoplastici ad alte prestazioni, sistemi adattivi, e requisiti multifunzionali (ad esempio, saldatura o processi per unire affidabilmente materiali diversi).

Protezione, resilienza e durabilità aumentate per mezzi di trasporto e infrastrutture grazie a:

- Rivestimenti e vernici per aumentare la durabilità e ridurre il consumo di carburante, rilevanti per aerospaziale, navigazione, automotive e segnaletica stradale.
- Processi di manifattura ibrida, come la combinazione di tecnologie additive basate su estrusione e posizionamento automatizzato delle fibre, tecnologie di giunzione, trattamenti superficiali e ispezione/controllo qualità automatizzati per grandi aerostrutture primarie e componenti dei motori.

Aumento della circolarità e miglioramento delle prestazioni ambientali dei materiali tramite:

- Materiali migliori per un uso sicuro e sostenibile (ad esempio, compositi riciclabili e/o biodegradabili, batterie ed elettronica in tutti i mezzi di trasporto).
- Nuovi materiali che riducono ulteriormente l'impatto ambientale e aumentano la resilienza delle infrastrutture di trasporto (ad esempio, impatto del ciclo di vita ridotto, uso circolare, materiali più resistenti e duraturi per strade/binari, minore impatto sulla biodiversità; pneumatici e freni con basse emissioni di particelle).
- Manutenzione e riparazione cost-efficient di compositi avanzati, superleghe, rivestimenti, strutture ibride e adattive per applicazioni di trasporto.



Edilizia

Miglioramento dell'efficienza energetica degli edifici: materiali tra cui schiume composite, materiali per isolamento termico e accumulo di energia, e sistemi energetici integrati aiutano a ridurre il consumo energetico degli edifici migliorando l'isolamento e l'efficienza dei sistemi energetici.

Strutture edilizie più robuste e durature: materiali compositi come il calcestruzzo rinforzato con grafene, materiali leggeri e nuovi materiali per la stampa 3D e la produzione additiva sono chiave per realizzare questo tipo di

strutture. Si considerano anche materiali per prefabbricazione e costruzione modulare, nonché materiali auto-monitoranti, auto-riparanti o auto-protettivi. Questi materiali aumentano la longevità e la robustezza delle strutture, migliorando anche il monitoraggio dell'integrità strutturale.

Maggiore benessere negli edifici: materiali per la riduzione del rumore, tecnologie di illuminazione e materiali con proprietà dinamiche come trasparenza ottica, elettronica basata su ossidi trasparenti, e trattamenti anti-accumulo, anti-ghiaccio, anti-scivolo, anti-corrosione o super-idrorepellenti migliorano il comfort degli ambienti e le loro prestazioni ambientali.

Miglioramento della circolarità e delle prestazioni ambientali: rivestimenti bio-based, formulazioni di vernici, isolamento basato su legno, adesivi e materiali compositi per l'edilizia affrontano il potenziale riscaldamento globale e migliorano la circolarità dei materiali da costruzione e delle loro fasi di smaltimento.



Elettronica

Migliori prestazioni in ambienti difficili, ridurre il consumo energetico e offrire nuove funzionalità nei componenti elettronici. Questi materiali coprono sensori, nuovi concetti di computing e memoria, elettronica di potenza, comunicazione (inclusi la trasmissione dei segnali e la gestione termica per le prossime generazioni di reti 5G e 6G), elettronica flessibile, optoelettronica, fotonica e componenti quantistici.

Nuove tecnologie di produzione e imballaggio dei chip: oltre al silicio, i materiali avanzati possono supportare nel miglioramento dell'efficienza, della durabilità, della sostenibilità e della circolarità, riducendo inoltre la dipendenza dai materiali critici. Questi materiali sono fondamentali per l'innovazione nella produzione di chip e per applicazioni in diversi settori come energia, potenza e comunicazione.

Il manifesto per i materiali avanzati del 2030

I materiali avanzati sono un fattore importante per la competitività delle industrie europee e rappresentano elementi cruciali per la resilienza e l'autonomia strategica aperta dell'Unione Europea. Come mostrato in Figura 3, i materiali avanzati sono inoltre inclusi nella lista delle 10 aree tecnologiche critiche per la sicurezza economica dell'UE (Commissione Europea, 2023). In particolare, essi includono:

- Tecnologie per nanomateriali, materiali intelligenti, materiali ceramici avanzati, materiali stealth, materiali sicuri e sostenibili by design
- Manifattura additiva, inclusa la stampa sul campo
- Produzione di micro-precisione controllata digitalmente e lavorazione/saldatura laser su piccola scala
- Tecnologie per l'estrazione, la lavorazione e il riciclaggio di materie prime critiche (es. estrazione idrometallurgica, biolisciviazione, filtrazione basata su nanotecnologie, lavorazione elettrochimica e black mass).

Nel 2022, un gruppo di autori influenti del mondo della ricerca, dell'innovazione e del policy-making ha elaborato il "Materials 2030 Manifesto", un documento che delinea le sfide e le opportunità per un'Unione Europea nella quale i materiali avanzati facciano da driver per la trasformazione di una varietà di settori (Cremonesi et al., 2022).

Gli autori identificano 4 pilastri come base per lo sviluppo dei materiali avanzati.

Salvaguardare la leadership tecnologica dell'Europa

- Con l'aumento della complessità nelle tecnologie digitali, energetiche e di mobilità, l'Europa deve sviluppare materiali avanzati più performanti e sostenibili, riducendo i tempi e i costi di mercato. Questo è essenziale per mantenere l'Europa all'avanguardia in settori strategici come la microelettronica, dove nuove innovazioni materiali saranno necessarie per superare i limiti fisici attuali, come nel caso del silicio.

Ridurre l'impronta ambientale

- Sviluppare materiali e tecnologie che utilizzino meno risorse, siano più facili da riciclare e incorporino soluzioni digitali moderne contribuirà a ridurre l'impronta ecologica e a creare un'economia più sostenibile, riducendo al contempo la dipendenza dalle materie prime importate. Ciò permetterà anche un maggiore allineamento con gli obiettivi del Green Deal.

Garantire l'autonomia strategica

- La pandemia di COVID-19 ha evidenziato la vulnerabilità delle catene del valore europee e la dipendenza da fornitori esterni per materiali critici. Per garantire l'autonomia strategica, l'Europa deve sviluppare e assicurare l'accesso a materiali avanzati, cruciali per le transizioni verde e digitale. Questo è essenziale per ridurre la dipendenza da altre regioni e proteggere l'industria europea dalla crescente competizione globale.

Puntare ai mercati dell'innovazione

- Sviluppare nuovi materiali avanzati in risposta ai bisogni della società e delle aspettative dei cittadini è cruciale per creare mercati dell'innovazione sostenibili. Un approccio centrato sulle persone, che promuova materiali sicuri, intelligenti e sostenibili, aiuterà l'Europa a guidare la creazione di nuovi mercati e modelli di business, assicurando che l'innovazione non solo soddisfi le esigenze attuali, ma crei anche nuove opportunità economiche per il futuro.



Figura 3. 10 aree tecnologiche critiche per la sicurezza economica dell'Unione Europea.

I materiali avanzati sono fondamentali per fornire soluzioni a molte applicazioni. Una selezione di applicazioni a nove mercati è riassunta in Figura 4.

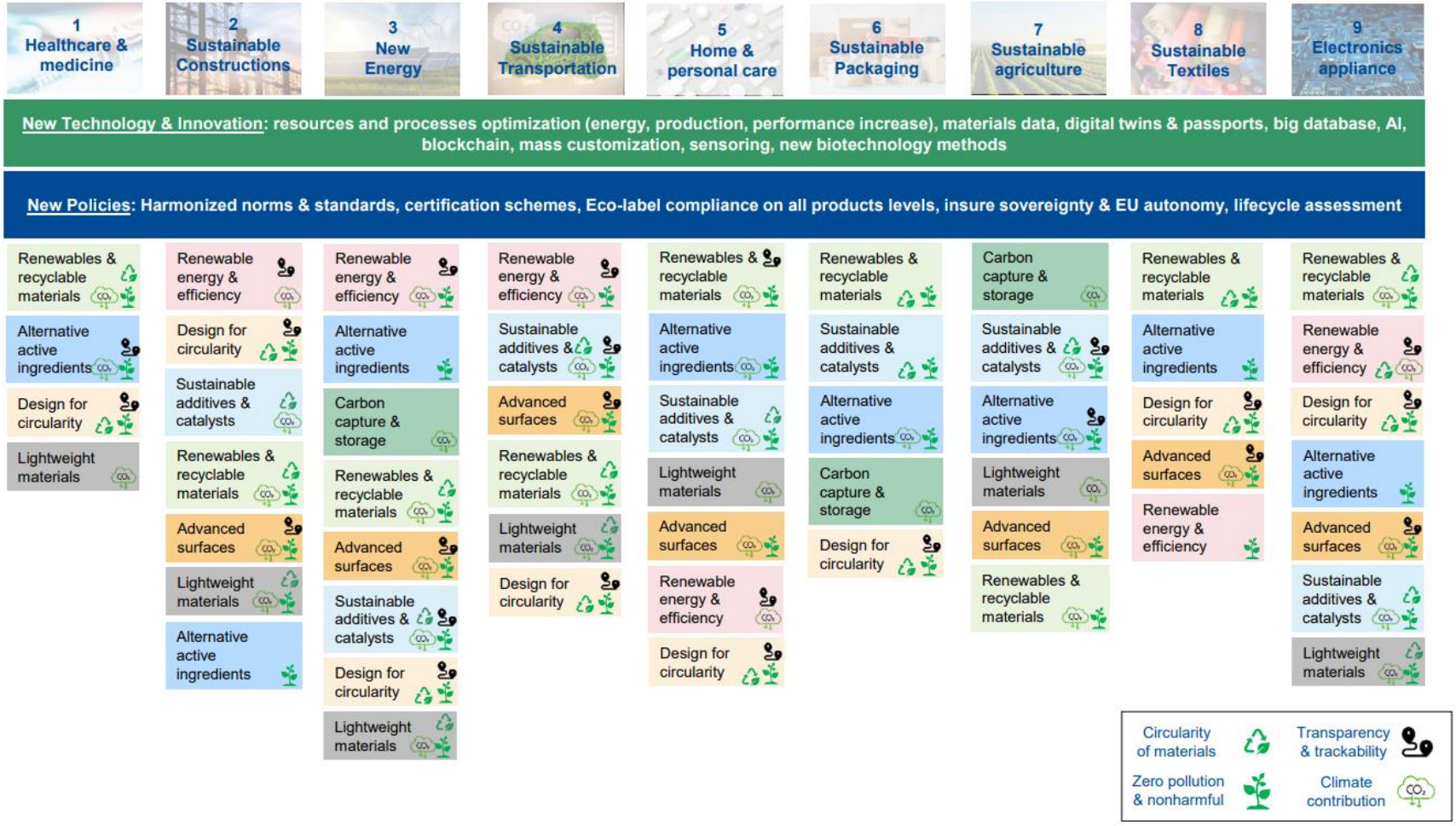


Figura 4. Applicazioni dei materiali avanzati e sfide intersettoriali in nove mercati di riferimento (credits: Cremonesi et al., 2022)

Le applicazioni sono mostrate in figura secondo un codice colore per dimostrare che esiste una significativa somiglianza nelle sfide relative ai materiali tra mercati differenti.

Inoltre, ogni applicazione è classificata secondo il valore che genera attraverso 4 categorie: circolarità dei materiali, inquinamento zero e non nocivo, trasparenza e tracciabilità, contributo climatico.

Emergono anche 2 fattori abilitanti trasversali: nuove tecnologie e innovazioni (banda verde) e nuove politiche (banda blu).

Uno schema più dettagliato è riportato in Figura 5, in cui sono riportate maggiori informazioni a livello delle specifiche dei materiali e delle loro relative esigenze di innovazione.

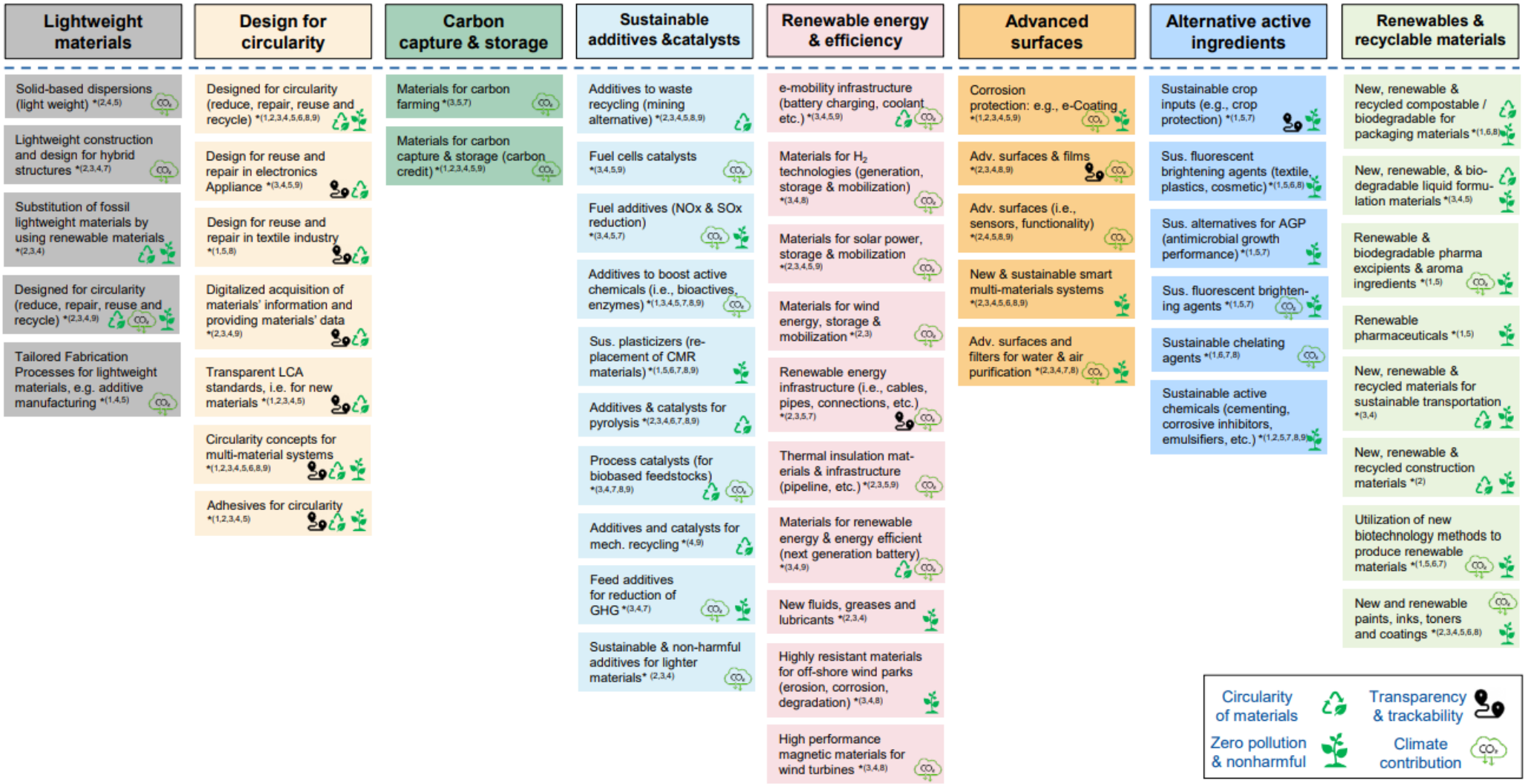


Figura 5. Specifiche dei materiali avanzati e relative esigenze di innovazione (credits: Cremonesi et al., 2022)

Il grafene e la grafine: quali scenari possibili per i "materiali delle meraviglie"?

Spesso definito il materiale delle meraviglie, il grafene è stato scoperto all'inizio degli anni 2000 e da allora il lavoro sul suo utilizzo e sfruttamento è stato intenso in tutto il mondo (si veda la Figura 6 per un trend riguardo il numero di brevetti relativi al grafene negli ultimi 24 anni).

Grazie alle sue proprietà, si prevede che il grafene consentirà enormi passi di sviluppo in diversi settori. La ricerca sul materiale "miracoloso" del grafene è stata insignita del Premio Nobel per la fisica già nel 2010.

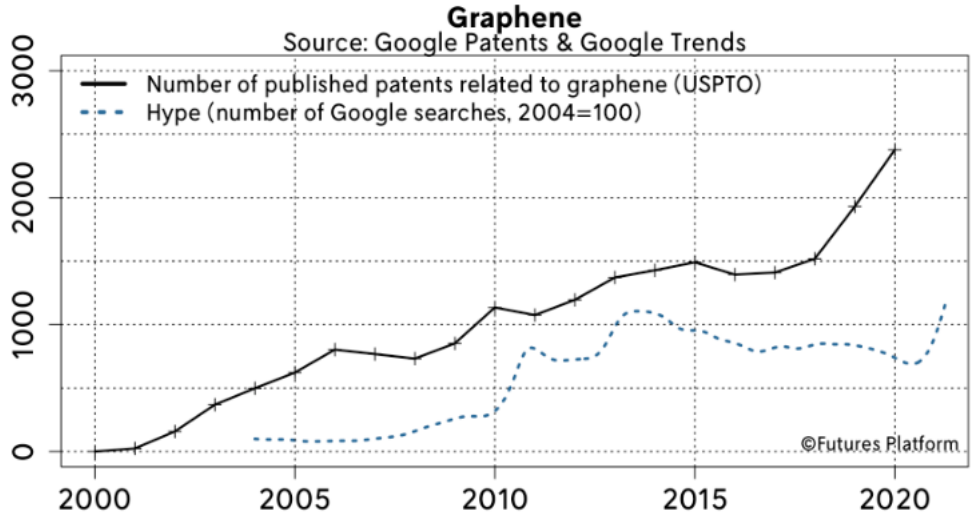


Figura 6. Numero di brevetti pubblicati relativi al grefene e presenza nei termini di ricerca Google (credits: Futures Platform)

Il grafene ha diversi usi da solo, ma ha un grande potenziale anche in combinazione con altre sostanze, il che ne amplia ulteriormente la portata futura. Attualmente, si prevede che il grafene fornirà soluzioni efficienti e attivamente ricercate, in particolare nei settori dell'elettronica, dell'edilizia, automobilistico, aeronautico, alimentare e medico e nei processi di purificazione dell'acqua. I processi di produzione avanzano costantemente e i primi prodotti in grafene sono già stati introdotti sul mercato. Ad esempio, l'asfalto arricchito con grafene è stato sperimentato per le superfici stradali nel Regno Unito ed è probabile che venga utilizzato in più località. Questo rivoluzionario rivestimento utilizzando il grafene potrebbe aiutare a spingere il settore delle costruzioni stradali verso una manutenzione più rispettosa del carbonio con una durata di vita prolungata delle caratteristiche stradali. Tuttavia, ci sono ancora molte sfide da risolvere prima che la rivoluzione del grafene passi dai laboratori all'uso significativo nell'industria. Una sfida chiave è trovare modi per produrre in serie il grafene a un prezzo competitivo senza compromettere la qualità del materiale o nessuna delle sue proprietà desiderate.

Nel 2020, i ricercatori del MIT hanno trovato un nuovo modo per produrre grandi quantità di grafene mantenendone la conduttività elettrica e le proprietà meccaniche. Questo nuovo metodo, che prevede il posizionamento dei fogli di grafene in un processo roll-to-roll, potrebbe essere la chiave per sbloccare le varie potenzialità del grafene. Potrebbe, ad esempio, consentire di posizionare celle solari trasparenti sui dispositivi mobili.

Insieme al grafene, il materiale miracoloso più recente, sintetizzato per la prima volta dagli scienziati della CU Boulder nel 2022, è la grafine (graphyne). La grafine è simile al grafene in quanto è anch'essa una struttura bidimensionale del carbonio. Tuttavia, a differenza del grafene, la grafine contiene doppi e tripli legami e i suoi atomi non hanno sempre una disposizione esagonale, il che consente tipi molto diversi di capacità supermateriali. Ad esempio, quando il grafene consente una conduzione bidirezionale superveloce degli elettroni, la grafine lo consente in una sola direzione. Questa proprietà potrebbe aiutare i ricercatori a progettare transistor più veloci e altri componenti elettronici che elaborano corrente unidirezionale superveloce.

Futures Platform (2024) ha elaborato 4 scenari relativi alla cosiddetta "rivoluzione del grafene" tra il 2030 e il 2040. Gli scenari sono diversi a seconda dell'importanza in ciascuno di questi sette fattori:

- Iniziative di economia circolare;
- Aumento di normative ambientali;
- Miniaturizzazione della tecnologia;
- Richieste energetiche;
- Investimenti in ricerca e sviluppo sul grafene;
- Rapporto costo-efficacia del grafene;
- Ricerca sulla superconduttività.

Ciascuno di questi fattori, negli scenari descritti, può essere presente in modo più o meno intenso, ossia può avere un ruolo maggiore o minore nello sviluppo degli scenari. Concretamente, rappresenteremo gli scenari in uno spazio a sette dimensioni, che avrà come base l'ettagono di Figura 7.



Figura 7. Spazio dei driver per gli scenari futuri per l'utilizzo del grafene (credits: Futures Platform)

Inoltre, per ogni scenario, illustreremo un possibile percorso di sviluppo temporale, rappresentato sotto forma di timeline, che sottolinea i cambiamenti che potrebbero intercorrere per portare al futuro descritto.

L'attenzione alla sostenibilità spinge il grafene nel mainstream

Nello scenario rappresentato in Figura 8, le migliori applicazioni del grafene e/o della grafine si trovano negli additivi sostenibili che spingono avanti il mercato in una società sempre più orientata all'ambiente, lasciando al secondo posto le aree di applicazione dell'alta tecnologia.

Con i paesi che implementano normative più severe per ridurre le emissioni di carbonio, il modo in cui produrre e integrare il grafene in modo sostenibile continua a guadagnare molta attenzione da parte di diversi settori.

Essendo un processo ecologico, la conversione dei rifiuti organici o di qualsiasi materiale a base di carbonio in grafene riduce significativamente i rifiuti domestici generando al contempo una grande quantità di grafene.

Questo grafene viene quindi aggiunto ai materiali da costruzione, riducendo l'impronta di carbonio di questi materiali nella produzione. Pertanto, concentrarsi sugli aspetti sostenibili del grafene aiuta a creare un processo circolare e a stimolare la crescita del mercato mondiale.

Un possibile percorso di realizzazione di questo scenario è rappresentato nella timeline in Figura 9.

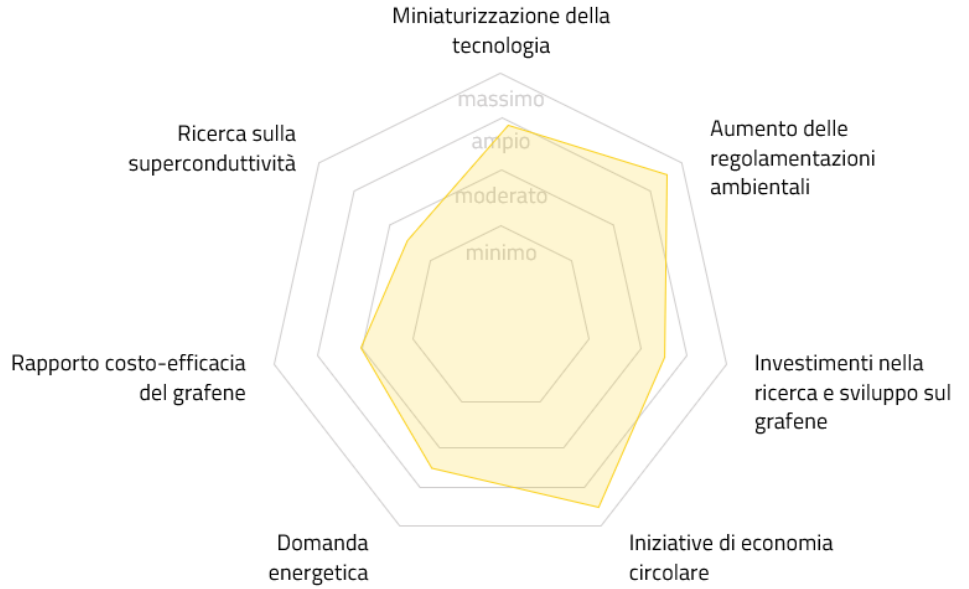


Figura 8. Ruolo dei driver nello scenario 'L'attenzione alla sostenibilità spinge il grafene nel mainstream' (Credits: Futures Platform)

Sempre più paesi introducono regolamenti, politiche e standard per mitigare efficacemente la propria impronta di carbonio. Anche i governi, le organizzazioni e le aziende continuano a finanziare investimenti in vari progetti di economia circolare.

2025

2026

Con l'accelerazione della transizione verso un'economia circolare, produttori e progettisti diventano sempre più responsabili degli impatti sulla produzione e del loro ciclo di fine vita.

I processi di produzione sostenibili del grafene sono adottati più facilmente e ampiamente. Ciò aiuta a ridurre il prezzo commerciale del grafene e a realizzare un processo circolare.

2028

2030

Consentendo ai processi di produzione del grafene di essere compatibili con i principi dell'economia circolare, la domanda di materiali a base di grafene aumenta enormemente. L'ulteriore vantaggio di sostenibilità del grafene aumenta le sue applicazioni in diversi settori industriali.

Figura 9. Timeline di realizzazione dello scenario 'L'attenzione alla sostenibilità spinge il grafene nel mainstream' (Credits: Futures Platform)

Il grafene miniaturizza ulteriormente l'elettronica migliorando l'efficienza

Nello scenario rappresentato in Figura 10, siamo in un futuro in cui l'elettronica sta diventando sempre più piccola pur mantenendo o migliorando la propria efficienza.

In questo scenario, la capacità di creare chip, transistor e batterie più piccoli inaugura l'elettronica di prossima generazione. Con la limitazione di miniaturizzare ulteriormente i chip di silicio, il grafene diventa un materiale ideale, sostituendo infine il silicio nell'elettronica.

L'uso del grafene nelle batterie ne migliora significativamente la longevità e la capacità. Ciò significa che l'elettronica di consumo continua a diventare più piccola ma più efficiente con una durata della batteria notevolmente migliorata.

Un possibile percorso di realizzazione di questo scenario è rappresentato nella timeline in Figura 11.

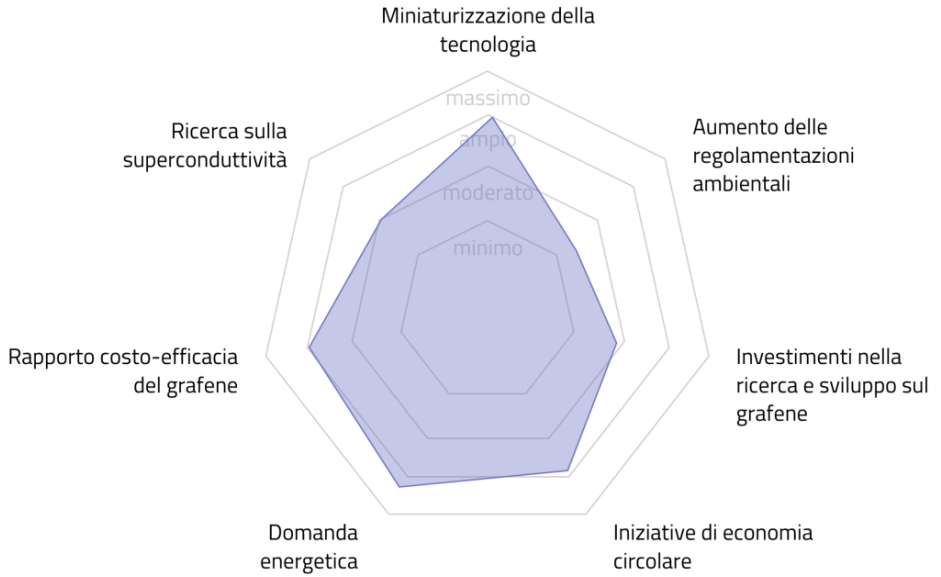


Figura 10. Ruolo dei driver nello scenario 'Il grafene miniaturizza ulteriormente l'elettronica migliorando l'efficienza' (Credits: Futures Platform)

Con la domanda di energia in costante aumento in tutto il mondo, la concorrenza per lo sviluppo di batterie più efficienti e di lunga durata diventa sempre più agguerrita.

2025

2028

Una nuova forma di grafene migliora il costo e l'efficienza delle batterie.

Le industrie facilitano l'adozione del grafene per l'elettronica su larga scala grazie al suo migliore rapporto costo-efficacia e alle sue straordinarie capacità, come l'elevata conduttività elettrica e termica.

2030

2032

Il grafene governa l'elettronica stampabile, indossabile e flessibile della prossima generazione grazie alle sue proprietà superiori. Anche le batterie a base di grafene vengono utilizzate per la produzione di massa. Ciò accelera significativamente l'adozione di veicoli elettrici che possono guidare per giorni con una sola carica e aumenta la produzione di energia solare.

Figura 11. Timeline di realizzazione dello scenario 'Il grafene miniaturizza ulteriormente l'elettronica migliorando l'efficienza' (Credits: Futures Platform)

La superconduttività nel grafene rappresenta una svolta significativa nelle applicazioni high-tech

Nello scenario rappresentato in Figura 12, la superconduttività ad alta temperatura nel grafene e/o nella grafene apre le porte a significative rivoluzioni tecnologiche in una vasta gamma di settori, dall'informatica quantistica ai trasporti, alla risonanza magnetica.

Con enormi quantità di ricerca e capitali investiti nella superconduttività basata sul grafene, si materializzano superconduttori che operano più vicino alla temperatura ambiente.

Ciò porta a enormi progressi sotto forma di un computer quantistico con una potenza di calcolo molto maggiore di qualsiasi altra cosa attualmente disponibile, scanner MRI con immagini più accurate e profonde dei tessuti umani e treni maglev con velocità sempre più elevate.

Un possibile percorso di realizzazione di questo scenario è rappresentato nella timeline in Figura 13.

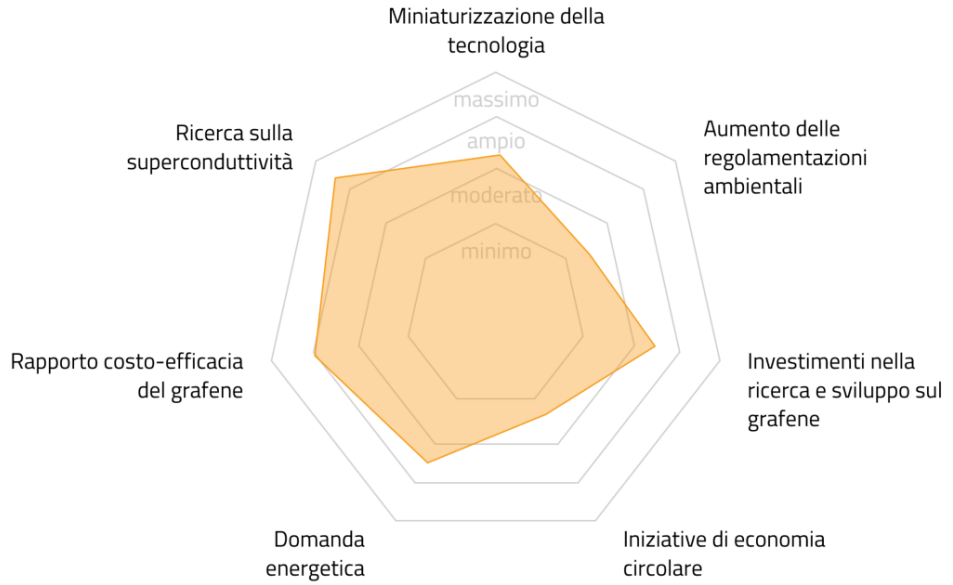


Figura 12. Ruolo dei driver nello scenario 'La superconduttività nel grafene rappresenta una svolta significativa nelle applicazioni high-tech' (Credits: Futures Platform)

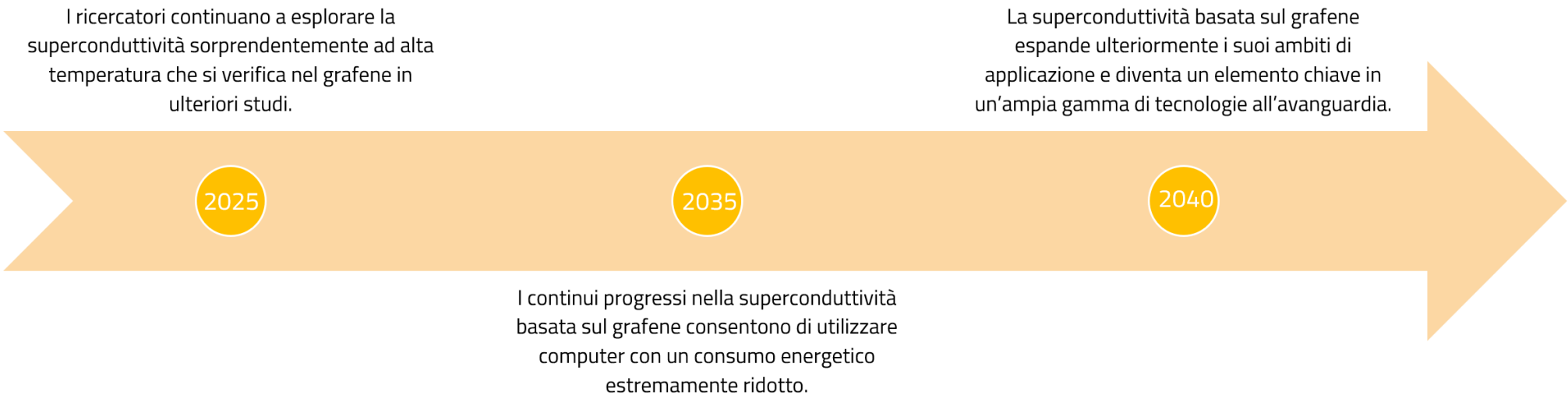


Figura 13. Timeline di realizzazione dello scenario 'La superconduttività nel grafene rappresenta una svolta significativa nelle applicazioni high-tech' (Credits: Futures Platform)

Il grafene rivoluziona ogni aspetto della società

Nello scenario rappresentato in Figura 14, tutte le impressionanti proprietà combinate del grafene e/o della grafine determinano un effetto completamente dirompente sull'economia globale.

Con un'enorme quantità di capitale investito in progetti di ricerca e sviluppo, vengono stabiliti modi rapidi ed economici per produrre materiali meravigliosi di alta qualità.

Ciò apre nuove aree di applicazione per entrambi in innumerevoli settori, tra cui trasporti, medicina, elettronica, energia, edilizia, informazione e depurazione delle acque. Ciò significa che il grafene e/o la grafine apportano miglioramenti rivoluzionari ai materiali e alle tecnologie esistenti, fornendo materiali e soluzioni tecnologiche pulite più piccoli, più leggeri e più efficienti.

Un possibile percorso di realizzazione di questo scenario è rappresentato nella timeline in Figura 15.



Figura 14. Ruolo dei driver nello scenario 'Il grafene rivoluziona ogni aspetto della società' (Credits: Futures Platform)

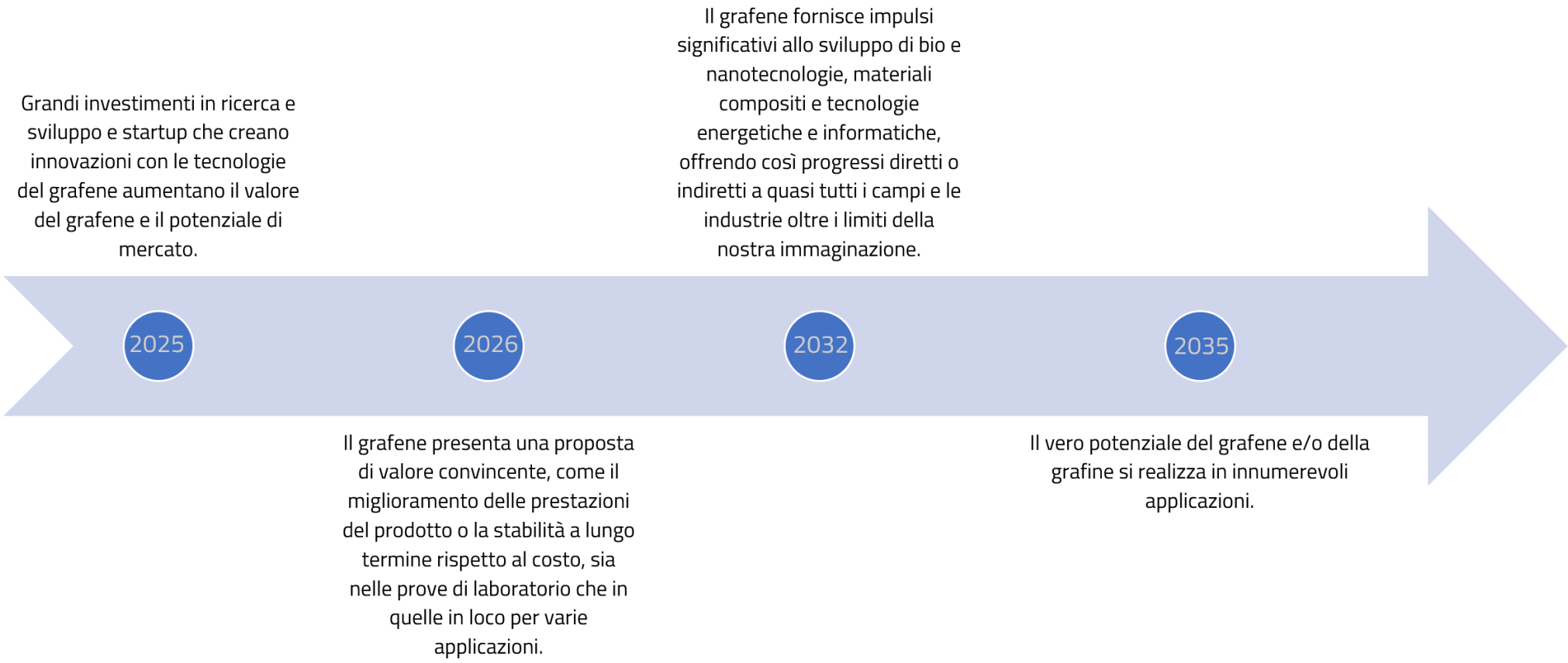


Figura 15. Timeline di realizzazione dello scenario 'Il grafene rivoluziona ogni aspetto della società' (Credits: Futures Platform)

Bibliografia

Barbosa, F., Lehmitz, S., Maksimainen, J., Mori, L., Richardson, B., Roth, E., Tai, H., Thakker, S., Wells, I., & Zemmel, R. (2024, February). Beyond the hype: New opportunities for gen AI in energy and materials. McKinsey & Company. https://www.mckinsey.com/industries/oil-and-gas/our-insights/beyond-the-hype-new-opportunities-for-gen-ai-in-energy-and-materials

Commissione Europea (2023). Annex to the Commission Recommendation on critical technology area for the EU's economic security for further risk assessment with Member States. https://defence-industry-space.ec.europa.eu/document/download/d2649f7e-44c4-49a9-a59d-bffd298f8fa7_en?filename=C_2023_6689_1_EN_annexe_acte_autonome_part1_v9.pdf

Cremonesi, A., Grobert, N., Gumbsch, P., Piketty, L., Montelius, L., Vandeputte, K., & Verilhac, I. (2022). Materials 2030 Manifesto: Systemic Approach of Advanced Materials for Prosperity – A 2030 Perspective. https://www.ami2030.eu/wp-content/uploads/2022/06/advanced-materials-2030-manifesto-Published-on-7-Feb-2022.pdf

Deloitte (2023a). Deloitte 2023 CxO Sustainability Report. https://www.deloitte.com/content/dam/assets-shared/legacy/docs/2023-deloitte-cxo-sustainability-report.pdf

Deloitte (2023b). The future of materials. https://www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/oil-and-gas/the-future-of-materials.html

European Commission. (2023). CORDIS Results Pack on advanced materials: Advanced materials research for industry and society. Publications Office of the European Union. https://cordis.europa.eu/article/id/443403-advanced-materials-research-for-industrial-applications-and-society/it

Tech4future, Data-drive materials, l'AI generativa alla prova della scienza dei materiali. https://tech4future.info/data-driven-materials-ai-generativ/


iFAB
INTERNATIONAL FOUNDATION
BIG DATA AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE
FOR HUMAN DEVELOPMENT


bi-rex
Big Data Innovation & Research Excellence


POLITECNICO
MILANO 1863
SCHOOL OF MANAGEMENT


osservatori.net
digital innovation

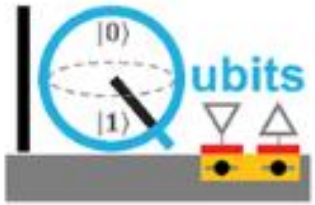

LAVAZZA
TORINO, ITALIA, 1895


MATERYS


Consiglio Nazionale
delle Ricerche


CNR NANOTEC
INSTITUTE OF NANOTECHNOLOGY


MAX
DRIVING
THE EXASCALE
TRANSITION


|0⟩
|1⟩
ubits


Warrant Hub
TINEXTA GROUP




erc


CODE4BIO

Per citare il report

Osservatorio sulle tendenze e le applicazioni del Supercalcolo (2024). "Osservazioni sui... NUOVI MATERIALI. Tendenze e applicazioni del Supercalcolo, Big Data e Quantum Computing". www.osservatorio.supercomputing-icsc.it

L'Osservatorio sulle tendenze e le applicazioni del Supercalcolo è un progetto del Centro Nazionale di Ricerca in High-Performance Computing, Big Data e Quantum Computing.

Realizzato e gestito da IFAB (International Foundation Big Data and Artificial Intelligence for Human Development), l'Osservatorio ha un focus privilegiato sulle PMI, sulle Pubbliche Amministrazioni e sulle Comunità.

L'attività dell'Osservatorio consiste nel mappare le più avanzate innovazioni tecnologiche, elaborare scenari futuri per lo sviluppo degli ecosistemi della ricerca e dell'innovazione e creare occasioni di incontro per i membri di questi ecosistemi.

Leggi questo e altri report su
www.osservatorio.supercomputing-icsc.it/report/

Finanziato dall'Unione europea NextGenerationEU
Ministero dell'Università e della Ricerca
Italiadomani PIANO NAZIONALE DI RIPRESA E RESILIENZA
ICSC Centro Nazionale di Ricerca in HPC, Big Data and Quantum Computing