

Electroquímica e Inteligencia Artificial: la Nueva Revolución en el Diseño de Materiales

Sandra Edith Benito-Santiago ¹, Juan Jesús Reyes-Valdez ^{1,*}, Luisiana Morales-Zamudio ², Tomas Lozano-Ramírez ², Lucero del Rocío Lozano-Ramírez ³ y José Guadalupe Corona-Aguilar ⁴

¹ EPM de la SECIHTI-Instituto Politécnico Nacional-Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Unidad Altamira, Carretera Tampico-Puerto Industrial Altamira Km. 14.5, Altamira 89600, Tamaulipas, México

² Instituto Tecnológico de Cd. Madero, Departamento de Ingeniería Química, Av. Primero de Mayo S/N, Col. Los Mangos, Cd. Madero 89440, Tamaulipas, México

³ Centro de Estudios Tecnológicos industrial y de servicios (CETis) No. 22 "Francisco Villa", República de Guatemala 100, Col. Las Américas, Tampico 89329, Tamaulipas, México

⁴ Centro de Bachillerato Tecnológico industrial y de servicios (CBTis) No. 105 "Ing. Alejandro Prieto Quintero", Boulevard I. Allende 24050, Col. Roger Gómez, Altamira 89602, Tamaulipas, México

* Autor de correspondencia: juan.jesus.reyes@hotmail.com

Artículo de divulgación científica

Recibido: 7 de agosto de 2026 Aceptado: 20 de septiembre de 2026 Publicado: 25 de octubre de 2026

DOI: <https://doi.org/10.56845/terys.v5i2.744>

Resumen: La electroquímica constituye la base de tecnologías clave para la transición energética, como los electrolizadores para la producción de hidrógeno verde, las baterías recargables y los sistemas de protección contra la corrosión. Tradicionalmente, el desarrollo de estos materiales ha dependido del ensayo y error y de cálculos teóricos muy detallados a nivel atómico, estrategias precisas, aunque lentas y costosas. En este contexto, la integración de la electroquímica con la inteligencia artificial (IA), mediante algoritmos de aprendizaje automático, incluidos modelos capaces de representar la estructura atómica de los materiales, está acelerando el descubrimiento y la optimización de catalizadores, electrodos y electrolitos al predecir sus propiedades antes de su síntesis. Además, los laboratorios autónomos integran modelado computacional, robótica y técnicas avanzadas de caracterización para cerrar el ciclo de descubrimiento de materiales. Este artículo ofrece una visión general de estas tendencias y analiza sus principales desafíos, entre ellos la disponibilidad y calidad de los datos, la capacidad de extrapolación de los modelos y la necesidad de una validación experimental rigurosa.

Palabras clave: electroquímica, inteligencia artificial, ciencia de materiales, laboratorios autónomos

Introducción

La transición hacia sistemas energéticos sostenibles requiere materiales electroquímicos más eficientes: catalizadores para producir hidrógeno por electrólisis, electrodos y electrolitos para baterías de mayor capacidad y recubrimientos resistentes a la corrosión (Chatenet *et al.*, 2022). La electroquímica, entendida como el estudio de las reacciones que ocurren en la interfaz entre un conductor electrónico (normalmente un metal) y un conductor iónico (electrolito), constituye el fundamento de estas tecnologías (Bard & Faulkner, 2001).

Sin embargo, el desarrollo de nuevos materiales electroquímicos ha dependido durante décadas de ciclos repetitivos de síntesis, caracterización y optimización. Incluso los métodos computacionales requieren tiempos elevados cuando deben explorar miles de composiciones posibles (Butler *et al.*, 2018). Como resultado, el descubrimiento de materiales innovadores ha sido un proceso lento y costoso.

Para superar estas limitaciones, en los últimos años la inteligencia artificial (IA) ha transformado el proceso de descubrimiento de materiales. Los modelos de aprendizaje automático identifican patrones en grandes bases de datos y predicen las propiedades de materiales aún no sintetizados (Ding *et al.*, 2024). Además, al combinarse con plataformas robóticas automatizadas, han dado lugar a los laboratorios autónomos (*self-driving labs*), capaces de proponer, realizar y analizar experimentos con una intervención humana mínima (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

En este contexto, el presente artículo revisa cómo la IA está transformando la electroquímica moderna. En particular, se analizan sus aplicaciones en el diseño de catalizadores, el desarrollo de baterías, la automatización experimental y la predicción de la corrosión, así como los principales desafíos que aún deben superarse para consolidar estas herramientas.

Desarrollo

De la electroquímica clásica a la ciencia de datos electroquímica

Cada técnica electroquímica genera información valiosa: las curvas de voltamperometría cíclica y los espectros de impedancia contienen datos sobre la transferencia de carga, la estabilidad y los mecanismos de reacción. Tradicionalmente, estos resultados se analizaban de forma aislada. No obstante, la creación de bases de datos abiertas y el crecimiento de la literatura científica han impulsado la transición hacia la ciencia de datos electroquímica, donde miles de experimentos se integran para descubrir relaciones entre la composición, la estructura y el desempeño de los materiales (Mistry *et al.*, 2021).

Como se ilustra en la Figura 1, este nuevo enfoque se basa en un ciclo continuo en el que los datos experimentales alimentan modelos predictivos que sugieren materiales prometedores. Posteriormente, estos candidatos se sintetizan y validan experimentalmente, y los resultados obtenidos retroalimentan la base de datos para mejorar las predicciones futuras. Sin embargo, la eficacia de este proceso depende en gran medida de la calidad y consistencia de la información disponible.

Uno de los principales desafíos es que los datos electroquímicos suelen ser heterogéneos. Diferentes laboratorios emplean protocolos distintos y algunos conjuntos contienen errores o valores atípicos, de modo que la información de baja calidad puede degradar el desempeño de los modelos (Deshsorn *et al.*, 2024). Además, muchos algoritmos presentan dificultades para extrapolar hacia materiales con composiciones distintas de las utilizadas durante el entrenamiento, un problema conocido como generalización de materiales (Ding *et al.*, 2024).



Figura 1. Ciclo cerrado de descubrimiento de materiales electroquímicos asistido por IA.

Con el propósito de superar estas limitaciones, se han desarrollado descriptores fisicoquímicos, es decir, propiedades que resumen las características de un material, como su composición química, estructura cristalina o propiedades electrónicas, y permiten a los modelos aprender la relación entre estructura y desempeño electroquímico (Butler *et al.*, 2018). Asimismo, se emplean representaciones basadas en grafos, en las que los átomos se representan como puntos (o nodos) y los enlaces químicos como líneas que los conectan, describiendo de forma más realista la organización estructural de los materiales (Gilmer *et al.*, 2017). En conjunto, estas estrategias mejoran la capacidad predictiva de los modelos y favorecen el descubrimiento acelerado de compuestos con propiedades prometedoras (Mai *et al.*, 2022).

Adopción de la inteligencia artificial en las áreas de la electroquímica

Con el fin de sustentar cuantitativamente la relevancia de la IA en las distintas áreas de la electroquímica, se realizó una búsqueda bibliográfica en la base de datos Scopus, cubriendo el periodo 2021–2026, empleando operadores de búsqueda que combinaron términos relacionados con inteligencia artificial y aprendizaje automático con descriptores específicos de cada área como se enlistan en la Tabla 1.

Tabla 1. Términos de búsqueda en Scopus para cuantificar la adopción de la inteligencia artificial en electroquímica (2021-2026)

Categoría	Términos de búsqueda
Baterías y almacenamiento de energía	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND ("battery" OR "batteries")
Corrosión	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND corrosion
Catálisis electroquímica	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND ("electrocatalysis" OR "Hydrogen Evolution Reaction" OR "HER" OR "Oxygen Evolution Reaction" OR "OER" OR "Oxygen Reduction Reaction" OR "ORR" OR "CO2 Reduction Reaction" OR "CO2RR")
Laboratorios autónomos	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND ("self-driving labs" OR "autonomous laboratory" OR "autonomous experimentation")
Reacciones electroorgánicas	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND ("electroorganic" OR "electro-organic" OR "organic electrosynthesis")

Como se resume en la Figura 2, las baterías y el almacenamiento de energía concentran el mayor número de publicaciones, seguidas por la corrosión y la catálisis electroquímica. En contraste, los laboratorios autónomos y las reacciones electroorgánicas presentan una producción científica considerablemente menor, lo que evidencia áreas emergentes con un amplio margen de crecimiento futuro pese a su potencial reconocido para reducir el tiempo y el costo asociados con el descubrimiento de nuevos materiales y procesos. A continuación, se describen las contribuciones de la IA en diversas áreas de la electroquímica.

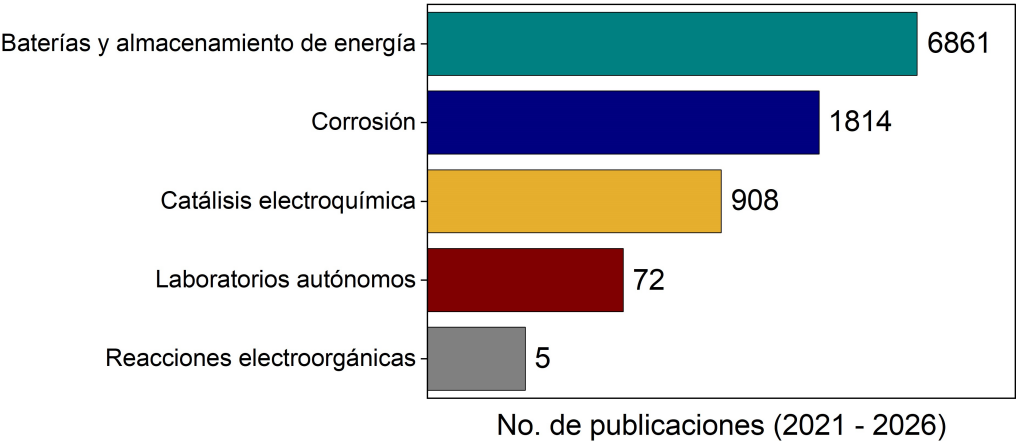


Figura 2. Número de publicaciones en Scopus (2021-2026) sobre la aplicación de la inteligencia artificial en distintas áreas de la electroquímica.

Baterías y almacenamiento de energía: la IA como acelerador de la innovación

El almacenamiento electroquímico de energía es uno de los campos más profundamente transformados por la inteligencia artificial, y el que concentra el mayor volumen de investigación en este ámbito (Figura 2). El diseño de baterías exige optimizar de manera simultánea propiedades como el voltaje, la capacidad, la estabilidad, la seguridad y la vida útil (Ng *et al.*, 2023). Debido al elevado número de variables involucradas, los enfoques basados exclusivamente en ensayo y error resultan cada vez menos eficientes.

Para afrontar esta complejidad, los modelos de aprendizaje automático permiten explorar rápidamente grandes bases de datos de materiales cristalinos. En particular, las redes neuronales profundas predicen voltajes, capacidades de almacenamiento y cambios de volumen asociados con la inserción de iones sin necesidad de efectuar simulaciones para cada material candidato (Moses *et al.*, 2022). En ciencia de materiales, estos modelos aprenden patrones a partir de grandes volúmenes de datos para predecir las propiedades de nuevos compuestos. Gracias a ello, es posible proponer millones de compuestos potencialmente estables para el desarrollo de electrodos, electrolitos y baterías de nueva generación (Merchant *et al.*, 2023).

Además del descubrimiento de nuevos materiales, la inteligencia artificial también está acelerando la optimización de baterías comerciales. En este contexto, Attia *et al.* (2020) demostraron que un algoritmo capaz de aprender de sus propios resultados en tiempo real podía identificar protocolos de carga rápida capaces de prolongar la vida útil de celdas de iones de litio utilizando un número considerablemente menor de experimentos. Estos resultados sugieren que el ciclo de innovación en el desarrollo de baterías podría reducirse de varias décadas a tan solo unos pocos años (Mistry *et al.*, 2021).

Corrosión, durabilidad y confiabilidad de los materiales

Además de acelerar el descubrimiento de nuevos materiales, la inteligencia artificial desempeña un papel cada vez más importante en la predicción de su comportamiento a largo plazo, siendo esta la segunda área de la electroquímica con mayor volumen de publicaciones relacionadas con IA en el periodo analizado (Figura 2). Un desafío fundamental consiste en anticipar los procesos de degradación y corrosión, responsables de reducir la vida útil de equipos e infraestructuras y de generar importantes pérdidas económicas en sectores como la energía, el transporte y la industria química.

Tradicionalmente, la evaluación de la resistencia a la corrosión ha requerido ensayos experimentales prolongados capaces de reproducir las condiciones reales de operación durante meses o incluso años. Con el objetivo de acelerar este proceso, los modelos de aprendizaje automático identifican relaciones entre la composición química, las condiciones ambientales y las variables electroquímicas que controlan la corrosión, permitiendo estimar tasas de degradación antes de realizar campañas experimentales prolongadas.

Los resultados obtenidos hasta ahora son prometedores. Distintos algoritmos de aprendizaje automático han demostrado una elevada capacidad predictiva para distintos tipos de corrosión, entre ellos la uniforme, la localizada (por picaduras) y la galvánica. En este sentido, una revisión sistemática reciente analizó el estado del arte de estas metodologías, identificó los algoritmos más adecuados para cada material y mecanismo de corrosión, y propuso una base de datos de referencia para el desarrollo de futuros modelos predictivos (Coelho *et al.*, 2022).

No obstante, la precisión de estas herramientas continúa dependiendo de la disponibilidad de datos experimentales confiables y representativos. En consecuencia, la estandarización de protocolos, la curación de bases de datos y el intercambio abierto de información serán fundamentales para mejorar la capacidad predictiva de la IA y favorecer el desarrollo de materiales electroquímicos más duraderos y confiables (Coelho *et al.*, 2022).

Inteligencia artificial en el diseño de catalizadores electroquímicos

Una de las aplicaciones más relevantes de la IA en electroquímica es el diseño de electrocatalizadores para reacciones fundamentales, como la generación de hidrógeno, la generación de oxígeno, la reducción de oxígeno y la conversión de dióxido de carbono (CO₂) en productos de valor agregado. Como se muestra en la Figura 2, esta área se posiciona como el tercer campo con mayor volumen de investigación en IA aplicada a la electroquímica. Este auge está impulsado por su capacidad para reducir los tiempos y costos asociados al descubrimiento de nuevos materiales, incrementando la probabilidad de identificar composiciones con un rendimiento superior.

Este avance ha sido posible gracias al desarrollo de modelos predictivos entrenados. Estos modelos estiman rápidamente la energía de adsorción (energía con la que una molécula o un átomo se une a la superficie de un catalizador), un indicador clave de la actividad catalítica (Nørskov *et al.*, 2009). De esta manera, es posible evaluar miles de superficies metálicas, aleaciones y óxidos en cuestión de segundos (Mai *et al.*, 2022), ampliando considerablemente el espacio químico explorable.

Un ejemplo representativo de esta estrategia es el *Open Catalyst Project*, que reunió más de un millón de estructuras para entrenar redes neurales capaces de predecir con alta precisión las interacciones entre superficies catalíticas y moléculas adsorbidas (Chanussot *et al.*, 2021). De forma similar, Zahrt *et al.* (2022) desarrollaron un algoritmo que evaluó cerca de 39 000 reacciones electroquímicas e identificó aquellas con mayor probabilidad de éxito experimental. Asimismo, otros estudios muestran que estas herramientas permiten priorizar electrocatalizadores con mayor

potencial para la producción de hidrógeno verde, optimizando el tiempo, los costos y el consumo de reactivos (Kim & Jang, 2023).

Laboratorios autónomos: cerrando el ciclo del descubrimiento

La predicción computacional debe complementarse con validación experimental. En este sentido, los laboratorios autónomos integran robótica, automatización e IA para ejecutar el ciclo completo de diseño, síntesis, caracterización y optimización de materiales (Abolhasani & Kumacheva, 2023). Como se muestra en la Figura 3, estos sistemas funcionan mediante retroalimentación continua: un modelo predictivo propone los experimentos más prometedores, un sistema robótico ejecuta las síntesis y pruebas, y los resultados actualizan el modelo, permitiendo que el algoritmo refine progresivamente sus predicciones.

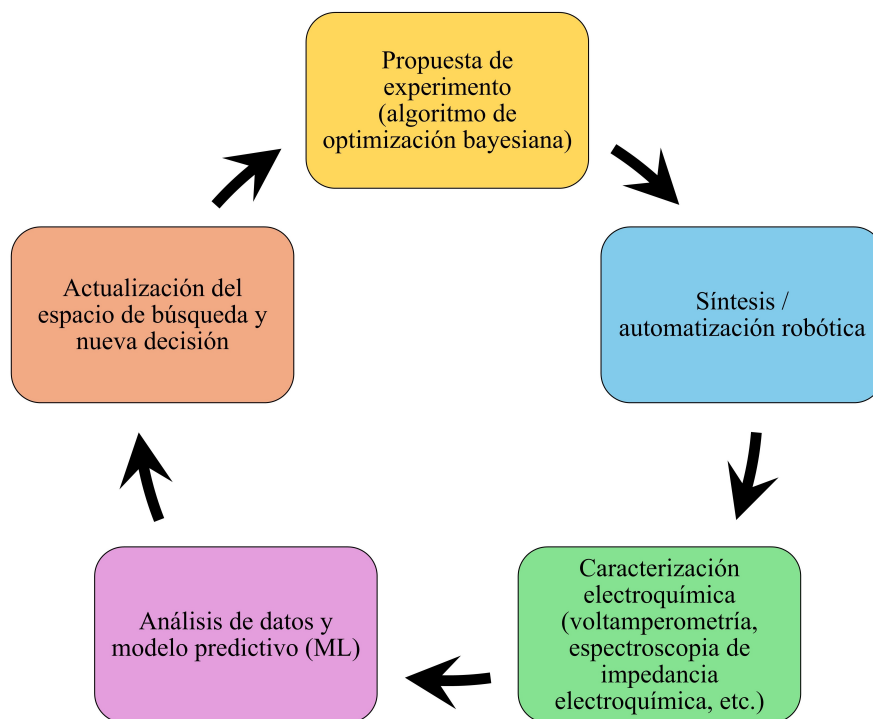


Figura 3. Esquema conceptual del funcionamiento de un laboratorio autónomo (*self-driving lab*).

La eficacia de este enfoque ha sido demostrada en diversas aplicaciones. Uno de los primeros ejemplos exitosos combinó una plataforma robótica con un algoritmo que aprende de los resultados de cada experimento para decidir, con mayor probabilidad de éxito, cuál realizar a continuación, reduciendo el número de experimentos, el tiempo y los costos (Shahriari *et al.*, 2016). Así fue posible explorar composiciones fotocatalíticas para producir hidrógeno e identificar formulaciones superiores tras varios días de operación continua (MacLeod *et al.*, 2020). Posteriormente, un robot móvil autónomo demostró ser capaz de desplazarse por un laboratorio, operar instrumentos analíticos y realizar cientos de experimentos en pocos días (Burger *et al.*, 2020).

Sobre la base de estos avances, surgieron plataformas más integradas como A-Lab, capaces de combinar cálculos de estabilidad de fases, minería de literatura, aprendizaje automático y robótica para sintetizar materiales inorgánicos de forma acelerada (Szymanski *et al.*, 2023). De manera complementaria, también se han desarrollado robots móviles que integran la síntesis química con técnicas analíticas, como la cromatografía y la resonancia magnética nuclear, en un flujo automatizado para el descubrimiento de nuevas reacciones (Dai *et al.*, 2024).

A pesar de estos progresos, persisten limitaciones en la incorporación de técnicas electroquímicas avanzadas. No obstante, la tendencia apunta hacia laboratorios capaces de operar de forma continua, donde el investigador se concentra en formular preguntas, interpretar resultados y diseñar nuevas estrategias, más que en ejecutar experimentalmente cada etapa del proceso (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

Retos, límites y perspectivas futuras

Si bien la inteligencia artificial ha transformado el descubrimiento y la optimización de materiales electroquímicos, persisten desafíos que deben resolverse antes de que estas herramientas alcancen todo su potencial. El primero de ellos es la disponibilidad de conjuntos de datos amplios, confiables y estandarizados. Muchos modelos se entrenan con información procedente de distintos laboratorios, bajo protocolos y niveles de calidad variables, lo que introduce sesgos y limita la capacidad de los algoritmos para generalizar hacia materiales no representados durante el entrenamiento (Deshsorn *et al.*, 2024).

Otro reto importante es la interpretabilidad de los modelos. Las redes neuronales profundas alcanzan niveles de precisión muy elevados; sin embargo, con frecuencia operan como "cajas negras": generan predicciones sin explicar los mecanismos fisicoquímicos que las sustentan. Esto dificulta la extracción de conocimiento científico y puede limitar la confianza de la comunidad investigadora, sobre todo cuando se busca comprender el comportamiento fundamental de los materiales (Zhong *et al.*, 2022).

Un desafío adicional corresponde al desarrollo de los laboratorios autónomos. Aunque estas plataformas han demostrado acelerar el descubrimiento de materiales, su implementación aún requiere inversiones importantes en robótica, automatización e infraestructura computacional. Además, muchos sistemas permanecen especializados en un número reducido de técnicas, por lo que será necesario ampliar su versatilidad y establecer protocolos estandarizados (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

En conjunto, los avances y desafíos descritos se sintetizan en la Figura 4. Este esquema muestra cómo el enfoque basado en inteligencia artificial y laboratorios autónomos sustituye gran parte del ensayo y error por una selección predictiva de los candidatos más prometedores, reduciendo potencialmente el número de experimentos, el tiempo de desarrollo y los recursos empleados. No obstante, su desempeño continúa dependiendo de la disponibilidad de datos de alta calidad, de la robustez de los modelos y de la validación experimental de sus resultados.

A pesar de estas limitaciones, existe un amplio consenso en que la inteligencia artificial no reemplazará el conocimiento electroquímico, sino que actuará como una herramienta complementaria para potenciarlo. De hecho, los modelos más exitosos integran grandes volúmenes de datos con principios físicos y químicos bien establecidos (Mistry *et al.*, 2021). En este escenario, el futuro de la electroquímica dependerá de una colaboración cada vez más estrecha entre especialistas en ciencia de materiales, electroquímica, informática y automatización experimental.

Conclusiones

La integración de la electroquímica con la inteligencia artificial está transformando el descubrimiento, el diseño y la optimización de materiales avanzados para aplicaciones energéticas. En particular, la IA ha acelerado el desarrollo de materiales electroquímicos al reducir el número de experimentos requeridos y orientar de manera más eficiente el

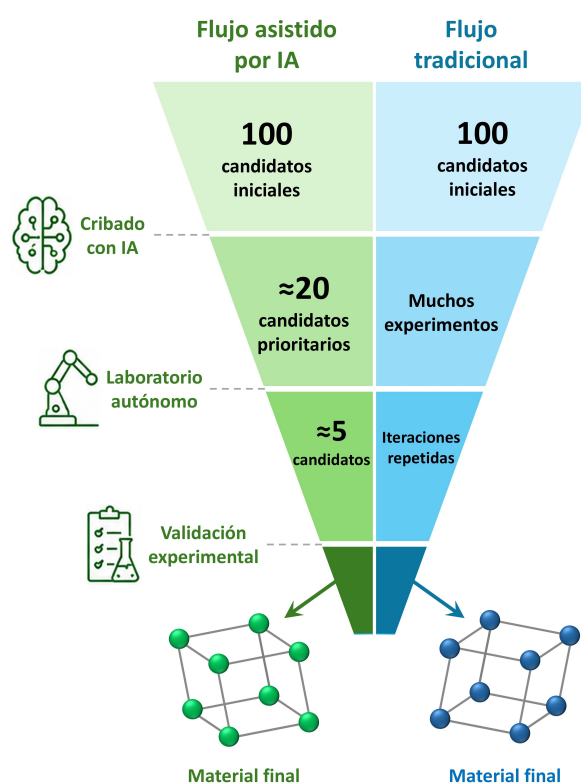


Figura 4. Esquema que ilustra la reducción relativa del número de candidatos durante el descubrimiento de materiales mediante un flujo de trabajo tradicional y uno asistido por inteligencia artificial y laboratorios autónomos.

diseño experimental. Asimismo, ha ampliado las posibilidades para predecir fenómenos de corrosión y favorecer el desarrollo de materiales más duraderos y seguros.

Pese a estos avances, la consolidación de estas tecnologías sigue dependiendo de la disponibilidad de bases de datos amplias, confiables y estandarizadas, de la capacidad de los modelos para generalizar hacia materiales no explorados y de la validación experimental de sus predicciones. En este contexto, los laboratorios autónomos representan una de las innovaciones más prometedoras al integrar modelado predictivo, automatización y experimentación en un ciclo continuo. No obstante, su implementación a gran escala aún enfrenta desafíos relacionados con la infraestructura, la estandarización y los costos.

En perspectiva, la combinación de conjuntos de datos más completos, modelos de IA más robustos e interpretables y plataformas experimentales automatizadas continuará acelerando el desarrollo de materiales electroquímicos para la producción y el almacenamiento de energía, la conversión electroquímica y la protección contra la corrosión. Más que sustituir el conocimiento científico, la inteligencia artificial se perfila como una herramienta complementaria que amplía la capacidad de los investigadores para explorar espacios químicos de enorme complejidad. En consecuencia, la colaboración interdisciplinaria entre electroquímicos, científicos de materiales, especialistas en inteligencia artificial e ingenieros será determinante para transformar estos avances en tecnologías sostenibles que impulsen la transición energética.

Bibliografía

- Abolhasani, M., & Kumacheva, E. (2023). The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences. *Nature Synthesis*, 2(6), 483–492. <https://doi.org/10.1038/s44160-022-00231-0>
- Attia, P. M., Grover, A., Jin, N., Severson, K. A., Markov, T. M., Liao, Y.-H., Chen, M. H., Cheong, B., Perkins, N., Yang, Z., Herring, P. K., Aykol, M., Harris, S. J., Braatz, R. D., Ermon, S., & Chueh, W. C. (2020). Closed-loop optimization of fast-charging protocols for batteries with machine learning. *Nature*, 578(7795), 397–402. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-1994-5>
- Bard, A. J., & Faulkner, L. R. (2001). *Electrochemical methods* (2.^a ed.). Wiley.
- Burger, B., Maffettone, P. M., Gusev, V. V., Aitchison, C. M., Bai, Y., Wang, X., Li, X., Alston, B. M., Li, B., Clowes, R., Rankin, N., Harris, B., Sprick, R. S., & Cooper, A. I. (2020). A mobile robotic chemist. *Nature*, 583(7815), 237–241. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>
- Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 559(7715), 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>
- Chanussot, L., Das, A., Goyal, S., Lavril, T., Shuaibi, M., Riviere, M., Tran, K., Heras-Domingo, J., Ho, C., Hu, W., Palizhati, A., Sriram, A., Wood, B., Yoon, J., Parikh, D., Zitnick, C. L., & Ulissi, Z. (2021). Open Catalyst 2020 (OC20) dataset and community challenges. *ACS Catalysis*, 11(10), 6059–6072. <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c04525>
- Chatenet, M., Pollet, B. G., Dekel, D. R., Dionigi, F., Deseure, J., Millet, P., Braatz, R. D., Bazant, M. Z., Eikerling, M., Staffell, I., Balcombe, P., Shao-Horn, Y., & Schäfer, H. (2022). Water electrolysis: From textbook knowledge to the latest scientific strategies and industrial developments. *Chemical Society Reviews*, 51(11), 4583–4762. <https://doi.org/10.1039/D0CS01079K>
- Coelho, L. B., Zhang, D., Van Ingelgem, Y., Steckelmacher, D., Nowé, A., & Terry, H. (2022). Reviewing machine learning of corrosion prediction in a data-oriented perspective. *npj Materials Degradation*, 6(1), 8. <https://doi.org/10.1038/s41529-022-00218-4>
- Dai, T., Vijayakrishnan, S., Szczypiński, F. T., Ayme, J.-F., Simaei, E., Fellowes, T., Clowes, R., Kotopantov, L., Shields, C. E., Zhou, Z., Ward, J. W., & Cooper, A. I. (2024). Autonomous mobile robots for exploratory synthetic chemistry. *Nature*, 635(8040), 890–897. <https://doi.org/10.1038/s41586-024-08173-7>
- Deshsorn, K., Lawtrakul, L., & Iamprasertkun, P. (2024). How false data affects machine learning models in electrochemistry? *Journal of Power Sources*, 597, 234127. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.234127>
- Ding, R., Chen, J., Chen, Y., Liu, J., Bando, Y., & Wang, X. (2024). Unlocking the potential: Machine learning applications in electrocatalyst design for electrochemical hydrogen energy transformation. *Chemical Society Reviews*, 53(23), 11390–11461. <https://doi.org/10.1039/D4CS00844H>
- Gilmer, J., Schoenholz, S. S., Riley, P. F., Vinyals, O., & Dahl, G. E. (2017). Neural message passing for quantum chemistry. En D. Precup & Y. W. Teh (Eds.), *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning* (Vol. 70, pp. 1263–1272). PMLR. <https://proceedings.mlr.press/v70/gilmer17a.html>
- Kim, J., & Jang, H. W. (2023). Can artificial intelligence boost developing electrocatalysts for efficient water splitting to produce green hydrogen? *Korean Journal of Materials Research*, 33(5), 175–188. <https://doi.org/10.3740/MRSK.2023.33.5.175>
- MacLeod, B. P., Parlante, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., Moreira, R., Yunker, L. P. E., Rooney, M. B., Deeth, J. R., Lai, V., Ng, G. J., Situ, H., Zhang, R. H., Elliott, M. S., Haley, T. H., Dvorak, D. J., Aspuru-Guzik, A., Hein, J. E., & Berlinguette, C. P. (2020). Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, 6(20). <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>
- Mai, H., Le, T. C., Chen, D., Winkler, D. A., & Caruso, R. A. (2022). Machine learning for electrocatalyst and photocatalyst design and discovery. *Chemical Reviews*, 122(16), 13478–13515. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00061>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80–85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- Mistry, A., Franco, A. A., Cooper, S. J., Roberts, S. A., & Viswanathan, V. (2021). How machine learning will revolutionize electrochemical sciences. *ACS Energy Letters*, 1422–1431. <https://doi.org/10.1021/acsenenergylett.1c00194>

- Moses, I. A., Barone, V., & Peralta, J. E. (2022). Accelerating the discovery of battery electrode materials through data mining and deep learning models. *Journal of Power Sources*, 546, 231977. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2022.231977>
- Ng, M.-F., Sun, Y., & Seh, Z. W. (2023). Machine learning-inspired battery material innovation. *Energy Advances*, 2(4), 449–464. <https://doi.org/10.1039/D3YA00040K>
- Nørskov, J. K., Bligaard, T., Rossmeisl, J., & Christensen, C. H. (2009). Towards the computational design of solid catalysts. *Nature Chemistry*, 1(1), 37–46. <https://doi.org/10.1038/nchem.121>
- Shahriari, B., Swersky, K., Wang, Z., Adams, R. P., & de Freitas, N. (2016). Taking the human out of the loop: A review of Bayesian optimization. *Proceedings of the IEEE*, 104(1), 148–175. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2015.2494218>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 624(7990), 86–91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Zahrt, A. F., Mo, Y., Nandiwale, K. Y., Shprints, R., Heid, E., & Jensen, K. F. (2022). Machine-learning-guided discovery of electrochemical reactions. *Journal of the American Chemical Society*, 144(49), 22599–22610. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c08997>
- Zhong, X., Gallagher, B., Liu, S., Kailkhura, B., Hiszpanski, A., & Han, T. Y.-J. (2022). Explainable machine learning in materials science. *npj Computational Materials*, 8(1), 204. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00884-7>