

Optimización del factor de rectificación de nanocanales iónicos mediante técnicas de aprendizaje automático

Tutor: Dra. Yamila Pérez Sirkin, **Co-tutor:** Dr. Mario Tagliazucchi

Grupo de Interfases y Materiales Blandos - simgroup.qi.fcen.uba.ar

Los nanocanales y nanoporos permiten controlar flujos iónicos, lo cual resulta de interés en nuevos métodos de sensado y generación de energía. Aquellos con formas asimétricas (por ejemplo: forma cónica, ver Figura) pueden rectificar corrientes iónicas: el flujo de iones que atraviesa el canal en una dirección dada (estado “abierto”) es mayor que el obtenido en sentido contrario al invertir polaridad del potencial (estado “cerrado”).^{1,2} De esta forma, los nanocanales asimétricos son los análogos iónicos de los diodos empleados en electrónica para rectificar corrientes eléctricas. Si bien numerosos trabajos han estudiado como la rectificación iónica depende de la forma y la carga superficial del nanocanal, el comportamiento es complejo y no se conocen aún cuales son la geometría y la distribución de carga que optimizan el fenómeno de rectificación.

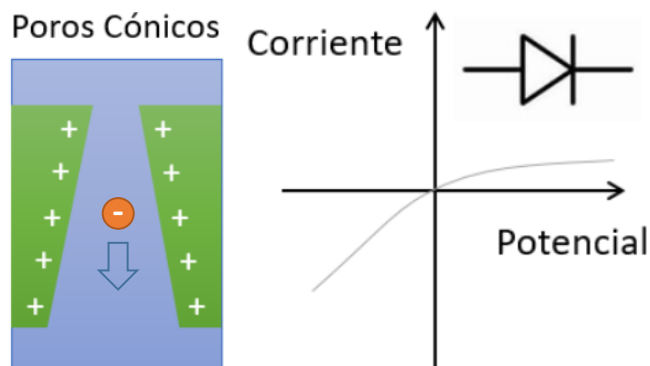
En este proyecto, proponemos explorar dos nuevos enfoques para abordar la optimización del fenómeno de rectificación iónica empleando técnicas de aprendizaje automático (*machine learning*). En el primer método, proponemos emplear simulaciones de elementos finitos para predecir las curvas corriente-potencial de nanocanales de forma y distribución de carga arbitrarias.^{1,2,3} Emplearemos estas predicciones para entrenar una red neuronal para predecir las curvas corriente-potencial a partir de la forma y distribución de carga del canal y viceversa. Finalmente emplearemos los sistemas así entrenados para encontrar los parámetros que optimizan la rectificación iónica (más concretamente, el factor de rectificación, el cual se define como el cociente entre las corrientes iónicas de los estados abierto y cerrado). El segundo método propuesto consiste en combinar los cálculos de elementos finitos con las técnicas de optimización conocidas como algoritmos genéticos, en las cuales la optimización se logra mediante un algoritmo inspirado en los procesos de selección natural y herencia.

Referencias:

[1] Mario Tagliazucchi e Igal Szleifer. *Chemically modified nanopores and nanochannels*. William Andrew, 2016.

[2] Tagliazucchi, M; Rabin, Y.; Szleifer, I.; “Transport rectification in nanopores with outer membranes modified with surface charges and polyelectrolytes”, *ACS Nano*, 2013, 7, 9085-9097.

[3] Tagliazucchi, M.; Szleifer, I; “Salt Pumping by Voltage-Gated Nanochannels”, *J. Phys. Chem. Lett.* 2015, 6 (18), 3534–3539



Los canales asimétricos (por ej. cónicos) rectifican el transporte de iones, es decir resultan en curva corriente-potencial asimétricas, comportándose como equivalentes iónicos a los diodos.